

Modellierung der komplexen optischen
Dielektrizitätskonstanten im
Spektralbereich der
Fundamentalabsorption der Halbleiter
vorgestellt am Beispiel der $\text{Ge}(1-x)\text{Si}(x)$ -
Mischkristallreihe

Keßler, Franz Rudolf

Veröffentlicht in:
Abhandlungen der Braunschweigischen
Wissenschaftlichen Gesellschaft Band 48, 1997,
S.87-132



Verlag Erich Goltze KG, Göttingen

Modellierung der komplexen optischen Dielektrizitätskonstanten im Spektralbereich der Fundamentalabsorption der Halbleiter vorgestellt am Beispiel der $\text{Ge}(1-x)\text{Si}(x)$ -Mischkristallreihe

Von **Franz Rudolf Keßler***, Dören

(Eingegangen am 11. 11. 1997)

Gliederung

<i>Kurzfassung</i>	87
<i>I Einleitung</i>	88
<i>II Imaginärteil der DK bei Interbandübergängen</i>	92
<i>III Imaginärteilanpassung</i>	108
<i>IV Realteil der DK bei Interbandübergängen</i>	119
<i>V Zusammenfassung</i>	129
<i>VI Literatur</i>	131

Kurzfassung

Sowohl zur Vorausberechnung, als auch zur Analyse der optischen bzw. elektronischen Eigenschaften der Halbleiter ist es von besonderer Bedeutung, deren komplexe Optische Funktion (OF) im Spektralbereich der Fundamentalabsorption in ihrer funktionalen Abhängigkeit von der Photonenenergie modellartig darzustellen. Liegen räumliche Inhomogenitäten vor bzw. variiert die Zusammensetzung des Materials, so muß die Modelldarstellung für jeden Individualparameter der OF eine entsprechende analytische Funktion enthalten. In der vorliegenden Arbeit wird diese Modelldarstellung für den konkreten Fall des $\text{Ge}(1-x)\text{Si}(x)$ Mischkristallsystems auf der Basis der quantenmechanischen Absorptionsprozesse entwickelt. Dabei werden sieben relevante Interbandübergänge berücksichtigt, die je spezifische Spektralanteile liefern und mit dem jeweiligen van-Hove-Typ der Singularität der kombinierten Zustandsdichte bzw. ihrem spektralen Verlauf in der Nähe der betreffenden kritischen Übergangsenergie korrespondieren. Der Spektralbereich umfaßt das relativ ausgedehnte Intervall von 0,5 eV bis 20 eV Photonenenergie und damit in geschlossener Form die gesamte sogen. Fundamentalabsorption der Ge-Si-Mischkristalle. Höherenergetische Anregungen (z. B. d-Band-Effekte) werden mittels einer additiven Suszeptibilitätskonstanten berücksichtigt. Das Ergebnis der Modellrechnung wird im Vergleich mit vorliegenden Messungen an reinem Germanium ($x = 0$), reinem Silizium ($x = 1$) sowie im gesamten Variationsbereich von x in

* Prof. em. Dr. F.R. Keßler · TU Braunschweig · Institut für Halbleiterphysik und Optik
Privatanschrift: Am Krausberg 12 · 52351 Dören

seiner Leistungsfähigkeit, insbesondere in dem 1,7 eV bis 5,6 eV Photonenenergie umfassenden Spektralbereich vorgestellt und diskutiert, für den experimentelle Daten vorliegen. – Die entwickelten quantenmechanisch begründeten Spektralfunktionen für den Beitrag der verschiedenen Typen von Interbandanregungen zum Imaginärteil der komplexen DK sind grundsätzlich allgemein gültig und lassen sich deshalb auch zu einer analogen Parametrisierung der komplexen OF auch anderer Halbleiter bzw. Isolatoren verwenden.

I Einleitung

Bei der Behandlung der dielektrischen Eigenschaften der Halbleiter im optischen Spektralbereich, der nach grundsätzlichen Erwägungen der Festkörperphysik eine Variation der Photonenenergie zwischen etwa 1/40 eV und 40 eV umfaßt, sind vier ganz verschiedene Wechselwirkungsmechanismen der Photonen zu berücksichtigen:

1. Die energetische Anhebung von gebundenen Elektronen innerhalb des Bändermodells,
2. die Anregung von freien Ladungsträgern,
3. die Erzeugung (auch Absorption) von Phononen und
4. die Wechselwirkung mit „Störstellen“ (Fremdatomen oder Strukturstörungen im Festkörperaufbau).

Im Rahmen der experimentellen und theoretischen Analyse dieser Wechselwirkungsmechanismen ist man stets um eine adäquate analytische Darstellung des sich ergebenden Dispersionsgesetzes bemüht. Zum einen wird damit der Gütegrad des Verständnisses der mikrophysikalischen Prozesse dokumentiert, zum anderen ist damit die Möglichkeit gegeben, für beliebige Photonenenergien die relative komplexe optische Dielektrizitätskonstante (DK) des Materials $\tilde{\epsilon}_{\text{rel}}$ anzugeben. Zugleich gelingt damit die Berechnung der optischen Konstanten, das sind die in der komplexen Brechzahl $\tilde{n} = (n - i \cdot k)$ zusammengefaßten reellen Größen Brechzahl n und Absorptionszahl k , mit Hilfe der Maxwellschen Relation

$$\tilde{n} = (\tilde{\epsilon}_{\text{rel}} \cdot \tilde{\mu}_{\text{rel}})^{1/2}, \quad (\text{Gl. 1})$$

wenn man die relative komplexe magnetische Suszeptibilität $\tilde{\mu}_{\text{rel}}$ des Materials gleich Eins setzen kann, was bei Halbleitern, von semimagnetischen Typen abgesehen, meist in guter Näherung gegeben ist.

Mit Kenntnis des Dispersionsgesetzes ergibt sich die Möglichkeit, inhomogene Strukturen in ihrer dielektrischen bzw. optischen Gesamtwirkung vorherzuberechnen. Gleichermaßen läßt sich nur bei Kenntnis des Dispersionsgesetzes das inverse Problem lösen, d. h. in Umkehrung aus der im Außenraum gemessenen Gesamtwirkung, z. B. aus den resultierenden Transmissions- und Reflexionsspektren, die im konkreten Fall vorliegende Inhomogenität in der Form der Ortsfunktion des relevanten Parameters quantitativ bestimmen. Dieser Problemkreis der „Reziprozität“ ist an anderer Stelle, einerseits

generell und andererseits bezogen auf Halbleiter mit einer eindimensionalen Inhomogenität in der Konzentration der freien Ladungsträger, quantitativ diskutiert worden [1]. – Die analoge Problematik besteht auch bei der Interpretation der an dünnen Schichten gewonnenen ellipsometrischen Messungen.

Speziell im langwelligeren Spektralbereich jenseits der Absorptionskante sind die Absorption freier Ladungsträger, diese mit ihrer durch das Bändermodell bestimmten effektiven Masse, und die Phononenanregung zu berücksichtigen. Voraussetzung ist dazu jedoch, daß im ersten Fall die Konzentration und im zweiten Fall das optische Dipolmoment hinreichend groß ist. In diesem langwelligeren Spektralbereich kann die sogen. Fundamentalabsorption der Halbleiter, d.h. der dielektrische Einfluß der etwa zwischen 0,5 eV und 12 eV Photonenenergie stattfindenden Interbandanregung, in einer konstanten „Hochfrequenz-Dielektrizitätskonstanten“ (HF-DK) zusammengefaßt werden. Gleichermäßen sind gegebenenfalls die energetisch gesehen noch höher angesiedelten Anregungsprozesse, z.B. Elektronenanregung aus dem d-Band und die Anregung der bei diesen Photonenenergien bereits als „frei“ anzusehenden Valenzelektronen, durch einen spektral konstanten reellen Suszeptibilitätsbeitrag zu berücksichtigen. – Für diesen langwelligeren Spektralbereich existieren gut bestätigte Dispersionsmodelle.

Im Spektralbereich der Fundamentalabsorption selbst, in dem sich die dielektrischen Einflüsse vieler und vom Typus her verschiedener Interbandübergänge überlagern, ist das Problem der Aufstellung eines analytisch formulierbaren Dispersionsgesetzes weniger gut gelöst, wenn ein relativ ausgedehnter Spektralbereich geschlossen umfaßt werden soll.

Für reine Elementhalbleiter bzw. III-V-Verbindungshalbleiter und im engeren Bereich einzelnen Interbandübergänge ist zwar eine gute Übereinstimmung zwischen der quantentheoretisch berechneten Dispersion und dem experimentellen Befund gegeben, wenn man zuläßt, daß bei der dann i. allg. geringen Zahl der inhärenten Parameter die in der Theorie noch unbestimmten Größen, wie z.B. Übergangswahrscheinlichkeiten und Niveauverbreiterungen, aus dem Experiment durch Anpassung quantitativ gewonnen werden. Aber es zeigen sich i. allg. im experimentellen Befund noch zusätzliche Strukturen, z.B. insbesondere Ausläufer vor Absorptionskanten, die auf die Tatsache zurückzuführen sind, daß in realen Kristallen die effektive Zustandsdichte von der idealisierter Kristalle abweicht. Bei amorphen Halbleitern besteht natürlich infolge der überwiegend statistischen Atomanordnung eine eigene Problematik bei der Modelldarstellung der komplexen Optischen Funktion¹.

Einen besonderen Problemkreis stellen Halbleiter-Mischkristalle, z.B. $\text{Ge}(1-x)\text{Si}(x)$ oder $\text{Ga}(1-x)\text{Al}(x)\text{As}$, insofern dar, als man bemüht ist, den spektralen Dispersionsverlauf der komplexen DK als Funktion des Zusammensetzungsparameters x aus den dielektrischen Funktionen der reinen Komponenten abzuleiten. Zur Darstellung der DK

¹ Für amorphe Halbleiter ist z.B. für den i. allg. spektral nur schwach strukturierten Bereich der Fundamentalabsorption als Modell ein Produkt aus einer quadratisch ansteigenden Kantenfunktion und einer entsprechend breiten Lorentz-„Linie“ vorgeschlagen worden [16].

der Mischkristalle werden dabei ganz verschiedene Modelltheorien von Mischmedien herangezogen, wobei die Suszeptibilitätsbeiträge der reinen Komponenten so verwendet werden, wie sie anhand der experimentellen Messung der optischen Konstanten der reinen Komponenten gewonnen wurden. Derartige Approximationen sind:

- a) im Sinne des Lorentz-Lorenz-Modells die Theorie nach Clausius-Mosotti [2],
- b) im Sinne des Effektive-Medium-Modells die Theorie nach Bruggeman [3] und
- c) im Sinne des Oszillator-Modells die Theorie der Überlagerung einer spektralen Abfolge diskreter Resonatoren [4].

Die vorliegende Arbeit befaßt sich demgegenüber mit einer weitergehenden modellmäßigen Darstellung der optischen Dispersion für den Spektralbereich der Fundamentalabsorption zwischen 0,5 eV und 20 eV, die damit im wesentlichen vollständig erfaßt wird. Die Darstellung bezieht sich hier auf eine relativ hohe Temperatur, etwa Zimmertemperatur bzw. höher als $T = 300 \text{ K}$, und vernachlässigt deshalb etwaige spektrale Feinstrukturen durch Excitonenbildung, wie sie insbesondere im Tieftemperaturbereich zu berücksichtigen (und zu beobachten) sind, wenn die thermische Energie $k_B T$ deutlich kleiner ist als die Excitonenbindungsenergie. Letztere liegt sowohl bei Germanium als auch bei Silizium in der Größenordnung von 10^{-2} eV , entsprechend $k_B \cdot 116 \text{ [K]}$ ($k_B =$ Boltzmann-Konstante).

Das hier entwickelte Modell der DK-Darstellung stützt sich auf realistische Spektralfunktionen für jeden der beteiligten Interbandübergänge unter Berücksichtigung des van Hove-Typus der zugeordneten Singularität der Zustandsdichte mit bzw. ohne Phononenbeteiligung. Numerisch berechnet werden auf diese Weise die spektralen Anteile am Imaginärteil der optischen Dielektrizitätskonstanten, die bei optisch linearer Materie additiv zu superponieren sind. Jeder spektrale Anteil ist durch entsprechende Individualparameter festgelegt.

Bezüglich der $\text{Ge}(1-x)\text{Si}(x)$ -Mischkristallreihe kommt als Aufgabe hinzu, für die Abhängigkeit der Optischen Funktion von dem Zusammensetzungsparameter x einen eindeutigen funktionalen Zusammenhang für die Individualparameter zu finden, so daß die gesamte x -abhängige Schar der Spektren von Real- und Imaginärteil der optischen DK geschlossen dargestellt wird. Das bedeutet den modellmäßigen Nachvollzug der großen Abwandlung der Spektren beim Übergang vom reinen Ge zum reinen Si. Für den Spektralbereich, in dem der Betrag des Imaginärteils der DK Werte größer als etwa 10 annimmt, bedeutet dies z. B. eine Verlagerung vom Intervall von 2,0 eV bis 4,7 eV für Ge in das Intervall 3,2 eV bis 5,4 eV für Si.

Dabei wird sich zeigen, ob eine quasilineare Verschiebung des Parameters der kritischen Bandabstände im System $\text{Ge}(1-x)\text{Si}(x)$, wie sie in Abhängigkeit vom Zusammensetzungsparameter x experimentell festgestellt wurde, auch für die übrigen Anpassungsparameter für jeden der prominent beteiligten Interbandübergänge in analoger Weise übernommen werden kann, oder ob diesbezüglich Nichtlinearitäten zu berücksichtigen sind.

Die Bestimmung der Individualparameter beginnt mit der Anpassung des Modells an experimentelle Spektren des Imaginärteils der optischen DK von Ge und Si. Die sich

unter Einsatz dieser Parameter ergebenden Modellspektren des Imaginärteils der relativen DK von fünf Ge-Si-Mischkristallen, die etwa gleichabständige x -Werte im Intervall $0 < x < 1$ besitzen, werden mit in der Literatur vorliegenden experimentellen Daten verglichen. Ein entsprechender Vergleich findet dann auch für die durch Kramers-Kronig-Transformation gewonnenen Spektren des Realteils der DK statt. Das Vergleichsergebnis wird kritisch diskutiert. Im Ganzen gesehen ergibt sich eine befriedigende Übereinstimmung.

Da die geforderte Gesamtdarstellung der Optischen Funktion für das Ge-Si-Mischkristallsystem innerhalb der erwarteten Fehlergrenzen als gelungen betrachtet werden kann, ist es aufgrund dieses Resultates der vorliegenden Arbeit nunmehr möglich, sowohl zur Vorausberechnung der optischen bzw. elektronischen Eigenschaften von inhomogenen, d. h. in x variierenden, Ge-Si-Systemen, als auch zur nachträglichen, zerstörungsfreien Inhomogenitätsanalyse entsprechend präparierter Schichten, die komplexe optische Dielektrizitätskonstante mit hinreichender Genauigkeit modellhaft darzustellen, wobei die analytische Dispersionsfunktion ausschließlich von einem einzigen Parameters, nämlich x , abhängt.

Auf diese Weise können insbesondere auch numerische Rechnungen, die sich auf die Lösung einer entsprechenden Optimierungsaufgabe stützen, relativ schnell und effizient durchgeführt werden.

Bleibt noch zu bemerken, daß speziell das System der $\text{Ge}(1-x)\text{Si}(x)$ -Mischkristalle im Anwendungsbereich moderner elektronischer und optischer Bauelemente eine bedeutende Rolle spielt, insbesondere in der Form periodischer oder nichtperiodischer Vielfachschichten mit variierendem x . In anderen Fällen ist das Bauelement eindimensional inhomogen in der Form eines kontinuierlichen Profils in Bezug auf den Parameter x . Derartige Dünnschichtsysteme, insbesondere auf Siliziumsubstraten aufgebracht, lassen sich relativ leicht im Rahmen der etablierten Siliziumtechnologie herstellen. Die gewonnene analytische Darstellung des Spektralverlaufs der optischen DK dürfte dabei in Bezug auf die Durchführung numerischer Rechnungen bei der Bauelementplanung und der Präparatanalyse von Vorteil sein.

Aber auch ohne unmittelbaren Bezug auf die Ge-Si-Mischkristallreihe erscheinen die hier entwickelten Bestandteile der Modelltheorie zur Darstellung einer komplexen Optischen Funktion im Bereich der Interbandübergänge der Halbleiter bzw. Isolatoren brauchbar zur Parametrisierung entsprechender Spektren anderer Materialien.

II Imaginärteil der DK bei Interbandübergängen

a) Grundsätzliches

Die Aufstellung eines Dispersionsmodells, d.h. hier die Entwicklung der Spektralfunktion der relativen komplexen DK $\tilde{\epsilon}_{\text{rel}} = \epsilon' + i\epsilon''$, beginnt zweckmäßigerweise mit dem Konzept einer analytischen Funktion für den Imaginärteil der DK, denn dieser entspricht dem dissipativen Teil des dielektrischen Responses. In diesem Fall überlagern sich bei gegebener Photonenenergie $E = h\nu$ verschiedene dissipative Anteile additiv. Der resultierende Wert von $\epsilon''(E)$ bei der Photonenenergie E ist damit gleich der Summe der Imaginärteile der beteiligten komplexen Suszeptibilitätsanteile bzw. gleich der Summe der Imaginärteile der gegebenen DK-Anteile:

$\epsilon''(E) = \sum \Delta\epsilon''(M_i, E)$. M_i charakterisiert dabei die beteiligten Anregungsprozesse. Die Additivität setzt allerdings voraus, daß sich das betreffende Material „optisch linear“ verhält, was bei nicht zu großen Intensitätsdichten der applizierten optischen Strahlung in der Regel als gegeben anzusehen ist.

Der Realteil der DK ist dagegen eine „integrale Größe“, d.h. bei gegebener Photonenenergie E_1 tragen jeweils auch alle anderen Spektralbereiche mit Absorption zum Wert von ϵ' bei. Diese Integration erfolgt gemäß der Kramers-Kronig-Relation (KKR), deren diesbezügliche Gleichung lautet:

$$\epsilon'(E_1) = 1 - (2/\pi) \int_{0, \text{HPTW}}^{\infty} [\epsilon''(E) \cdot E / (E^2 - E_1^2)] \cdot dE \quad (\text{Gl. 2})$$

In der vorliegenden Arbeit wird in diesem Sinne verfahren (siehe weiter unten).

Im Bereich der Fundamentalabsorption eines Halbleiters überlagern sich eine Vielzahl von dissipativen Interbandanregungen, wobei der für einen spezifischen Interbandübergang gültige spektrale Anregungsbereich durch den jeweils kleinsten und größten wirksamen energetischen Abstand der beteiligten Bänder gegeben ist. Dabei sind u.U. noch gewisse „Verbreiterungen“ zu berücksichtigen (vgl. weiter unten). Innerhalb eines solchen definierten Übergangsbereichs verläuft das Spektrum des Imaginärteils der dielektrischen Suszeptibilität nach Maßgabe des Übergangscharakters (erlaubt oder verboten, direkt, d.h. ohne Phononenbeteiligung, oder indirekt, d.h. mit Phononenbeteiligung) und nach Maßgabe des Types der zugeordneten van-Hove-Singularität. Derartige Spektren zeigen meist eine spektral charakteristische Einsatz- oder Abfallkante und haben in der Nähe einer solchen „Schwelle“ einen signifikanten Verlauf, der sich nach Maßgabe der beteiligten Zustandsdichten quantenmechanisch berechnen läßt.

Aufgrund allgemeiner Beziehungen zwischen dem optischen Absorptionskoeffizienten und der komplexen relativen DK gilt für jeden Beitrag zum Imaginärteil der DK bei der Photonenenergie E_1 :

$$\Delta\epsilon''(M_i, E_1) = \text{const} \cdot (n(E_1))^2 \cdot (1/E_1) \cdot D(E_1) \cdot f_{\text{osz}}(E_1) \cdot F_{\text{BW}}(E_1) \quad (\text{Gl. 3})$$

mit den dem jeweiligen Übergang M_i zugeordneten Funktionen der Größen:

$$\left. \begin{aligned}
 D(E_i) &= \text{kombinierte Zustandsdichte} \\
 f_{\text{osz}}(E_i) &= \text{Oszillatorenstärke} \\
 F_{\text{BW}}(E_i) &= \text{„Besetzungsfaktor“ der beteiligten Energiezustände} \\
 n(E_i) &= (\text{reelle}) \text{ Brechzahl}
 \end{aligned} \right\} \quad (\text{Gl.4})$$

Bei nicht zu hohen Temperaturen kann die Besetzungswahrscheinlichkeit des Ausgangszustandes gleich Eins und die des Endzustandes gleich Null gesetzt werden. Der Besetzungsfaktor nimmt dann den Wert Eins an.

Die Oszillatorenstärke variiert bei sogen. erlaubten direkten Interübergängen nur schwach mit der Photonenenergie, so daß dann auch dieser Faktor in relativ engen Spektralbereichen gleich Eins gesetzt werden kann.

Da ebenfalls die reelle Brechzahl in dem relativ engen Spektralbereich des betrachteten Suszeptibilitätsbeitrages eines bestimmten Interbandüberganges als integrale Größe nur relativ schwach variiert, so kann der Faktor $(n(E_i))^2$ in den Proportionalitätsfaktor einbezogen werden.

Damit wird der Imaginärteil des Suszeptibilitätsbeitrages eines betrachteten Interbandüberganges signifikant nurmehr durch den spektralen Verlauf der kombinierten Zustandsdichte $D(E_i)$ bestimmt. Die für die vier Typen der van-Hove-Singularitäten gültigen Spektralfunktionen der kombinierten Zustandsdichte sind in der Literatur ausführlich abgeleitet bzw. diskutiert [5]. Sie werden hier verwendet. Die Abb. 1 gibt dazu eine Zusammenstellung an.

Diese Spektralfunktionen der kombinierten Zustandsdichte gelten jedoch nur in der Nähe der für den jeweiligen Übergang typischen Schwellenergie E_0 , die in der Regel durch die Ausprägung einer typischen spektralen „Absorptionsstruktur“ gekennzeichnet ist.²

Die sich ergebende und nur in einem begrenzten Spektralbereich in der Nähe der Schwellenergie gültige Funktion des Imaginärteils der DK für einen betrachteten Interbandübergang muß deshalb und zur Berücksichtigung realistischer Modifikationen in zweifacher Weise ergänzt werden:

i) Berücksichtigung exponentieller Ausläufer

Die Zustandsdichte erstreckt sich i. allg. noch in die verbotene Energielücke hinein aus, wo sie dann mit einem quasiexponentiellen Ausläufer abklingt („tailing“), denn einerseits besitzen reale Kristalle Strukturstörungen, die in den verbotenen Energielücken doch zu erlaubten Elektronenzuständen führen, und/oder andererseits bewirken die Phononen im Kristall eine in der Größenordnung der thermischen Energie $k_B T$ liegenden „Aufweichung“ der Energiekanten, die beim absoluten Temperaturnullpunkt theoretisch gesehen „scharf“ erwartet werden. Ein diesbezüglich niederenergetischer Kantenausläufer kann insbesondere häufig auf der langwelligen Seite des Einsatzgebietes der Fundamentalabsorption experimentell gut beobachtet werden und wird unter der

² Zur Erleichterung der Schreibweise wird gegebenenfalls „ E_0 “ durch „EK“ ersetzt.

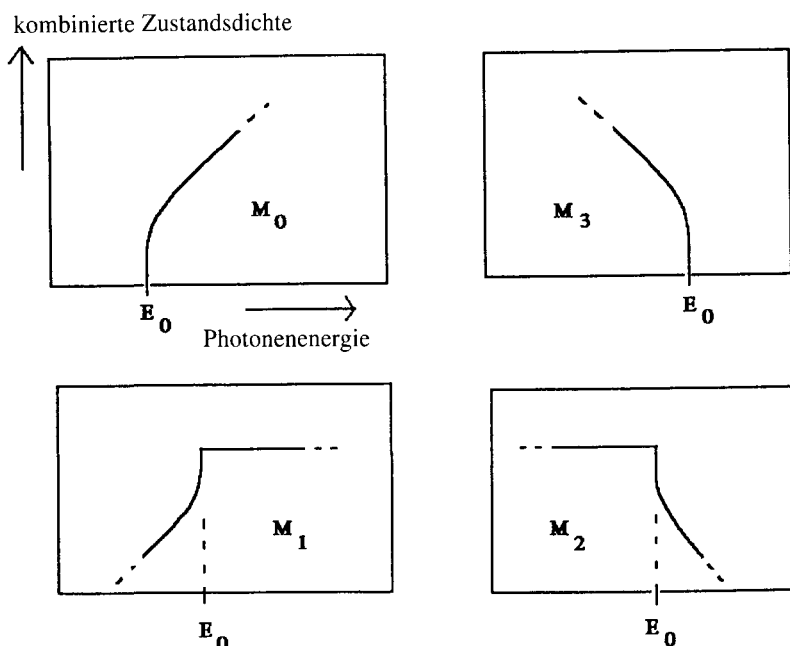


Abb. 1:

Schematische Darstellung des spektralen Verlaufs der kombinierten Zustandsdichte in der Nähe der kritischen Energie E_0 bei den vier verschiedenen Typen der van-Hove-Singularität eines dreidimensionalen Kristalls: M_0 , M_1 , M_2 und M_3

Bezeichnung „Urbach-Ausläufer“ diskutiert [6]. – Im vorliegenden Fall wird für die Tailing-Funktion generell der Ansatz eines exponentiellen Abfalls verwendet, wobei die Steigung $(\partial \varepsilon'' / \partial E)$ bei der Schwellenenergie E_0 von links und rechts durch interne Anpassung gleich ist (vgl. weiter unten).

ii) Berücksichtigung der endlichen Breite des Absorptionsbereiches eines spezifizierten Interbandüberganges

Setzt mit wachsender Photonenenergie ein Interbandübergang ein und verläuft zunächst das Absorptionsspektrum ansteigend mit der erwarteten theoretischen Funktion, so muß doch wieder ein Abfall auf Null erfolgen, denn die maximal überbrückbare energetische Differenz bei der Beteiligung der beiden zugrunde liegenden Bänder ist von endlichem Wert, selbst wenn die gesamte Brillouin-Zone für den Elektronen-Ausgangsimpuls berücksichtigt wird. Die entsprechenden höherenergetischen Abfallfunktionen werden in der Literatur i.allg. nicht diskutiert, denn meist wird eine derartige, mit wachsender Photonenenergie monoton fallende Struktur des definierten Überganges durch den Einsatz eines anderen, bei noch höheren Photonenenergien gelegenen Interbandüberganges signifikant überdeckt. – Bei der quantitativen Berechnung des Ima-

ginärteils der DK als der Summe aller imaginären Suszeptibilitätsanteile kann ein solcher „unterlegter“ Ausläufer in seiner spektralen Abhängigkeit jedoch nicht außer Betracht gelassen werden.

In der vorliegenden Arbeit wird deshalb ein mit wachsender Photonenenergie sigmoid erfolgender Abfall bzw. Anstieg des Betrages des Imaginärteils des Suszeptibilitätsanteils multiplikativ zur theoretischen Dispersionsfunktion der herrschenden van-Hove-Singularität in das Modell eingebaut. Mit den Asymptoten Eins und Null bei anpassungsfähiger maximaler Steigung kann diese „Abschneidefunktion“ mit dem Wert 0,5 an der Stelle ihres Wendepunktes in der spektralen Lage so positioniert sein, daß der theoretische, z. B. durch die kombinierte Zustandsdichte bestimmte, Spektralverlauf der Absorption im charakteristischen Bereich einer Absorptionskante praktisch unverändert in Erscheinung tritt.

Als sigmoid verlaufende „Abschneidefunktion“ bzw. „Anstiegsfunktion“ wird in diesem Sinne die „Fermi-Besetzungsfunktion“ bzw. die dazu komplementäre Funktion verwendet. Eignen würde sich als sigmoide Stufenfunktion wahrscheinlich auch das Gaußsche-Fehlerintegral, jedoch besitzt die Fermifunktion im Vergleich damit den Vorteil, eine analytische Darstellbarkeit zu besitzen, was die Anpassung erleichtert. – Die in der „Fermi-Abschneidefunktion“ auftretenden Parameter „BF“ und „TF“ bestimmen die Photonenenergie ($E_0 + BF$) für die spektrale Lage des Wertes 1/2 und die Steilheit des Abfalls an dieser Stelle bzw. die spektrale Lage für die Werte 0,73 und 0,27 bei der Photonenenergie ($E_0 + BF - TF$) bzw. ($E_0 + BF + TF$).

Ausgehend von dem Bändermodell von Silizium bzw. Germanium und auf der Basis der bestehenden Zuordnung der Strukturen der jeweiligen Fundamentalabsorption in beiden Halbleitern [7] werden bei Germanium und Silizium sowie innerhalb der Ge-Si-Mischkristallreihe sieben Interbandübergänge berücksichtigt. Dabei handelt es sich um einen erlaubten indirekten Übergang mit dem Typus einer van-Hove-Singularität M_0 und um sechs erlaubte direkte Übergänge mit den Typen M_0 , M_1 , M_2 und M_3 . Die Tabelle 1 stellt (auszugsweise) die Übergangsenergien für Ge und Si zusammen, wie sie in der Literatur angegeben werden.

Hier ist zu bemerken, daß in der vorliegenden Arbeit die durch die Spin-Bahn-Koppelung hervorgerufene geringfügige Verschiebung eines „Teilbandes“ nicht berücksichtigt wurde, denn die dabei auftretende energetische Differenz ist relativ klein (bei Ge liegt sie zwischen 0,1 und 0,3 eV mit abnehmender Tendenz beim Übergang zum Si auf den Wert praktisch Null – vgl. Tabelle 1) und liefert oberhalb der eigentlichen Schwellenergie E_0 i. allg. nur eine relativ geringfügige spektrale Feinstruktur, die insbesondere bei Raumtemperatur meist kaum quantitativ in Erscheinung tritt.

Im Rahmen der in der Literatur zu findenden Analyse [7, 11] ist festgestellt worden, daß sich die den Interbandübergängen zuzuordnenden Schwellenergien innerhalb der Mischkristallreihe praktisch in linearer Funktion mit x von den Werten für Ge zu den Werten für Si verändern. Diese Erkenntnis einer zu x proportionalen Verlagerung der Einsatzenergien der genannten Interbandübergänge hat sich auch bei der Interpretation bzw. Analyse magnetooptischer Spektralfunktionen ergeben [8]. Eine derartige quasilineare Transformation innerhalb des Bändermodells beim Übergang zwischen Silizium und Germanium ist letztlich der Ausdruck der gleichen Kristallsymmetrie vom Dia-

mant-Typus. So bleiben auch die Übergänge an der gleichen Stelle in der Brillouin-Zone lokalisiert. Einzig ändert sich innerhalb der Brillouin-Zone die Richtung des langwelligsten indirekten(!) Interbandüberganges von Γ'_{25} nach L_1 beim Germanium in die Übergangsrichtung von Γ'_{25} nach X_1 beim Silizium. Abb. 2 dient der Erläuterung des Bändermodells der Diamantstruktur und enthält die in Tabelle 1 aufgeführten und hier im Modell berücksichtigten Interbandübergänge.

Dem in der Literatur quantitativ vorliegenden Bändermodell von Ge und Si kann man auch eine erste Abschätzung für die Breite des einem definierten kritischen Punkt zugeordneten Absorptionsbereiches, der praktisch bei der Schwellenergie E_0 beginnt

Interne Kennung (1)	Bezeichn.	Übergang im k -Raum	Typ	Ge	Si
IN (2)	indirekt	$\Gamma'_{25} \rightarrow L_1$	M_0 + Phonon	0,65 [5a, 11]	–
In (2)	indirekt	$\Gamma'_{25} \rightarrow X_1$	M_0 + Photon	–	1,1 [5a, 13]
A (3) (4)	E_0 ; ($E_0 + \Delta_0$)	$\Gamma'_{25} \rightarrow \Gamma'_2$	M_0	0,8 [5, 7, 11, 13]	4,05 [7] 4,2 [11] 4,0 [13]
B	e_1 ; ($e_1 + \Delta_1$)	$L'_3 \rightarrow L_1$	M_0	1,74 [5a] 2,10 [5b] 2,00 [13]	3,15 [5a] 3,20 [13]
C (3) (4) (5)	E_1 ; ($E_1 + \Delta_1$)	$\Delta_3 \rightarrow \Delta_1$	M_1	2,10 [5a] 2,30 [5b] 2,10 [7] 2,188 [11] 2,2 [13]	3,4 [7] 3,395 [11]
D (5)	E'_0 ; ($E'_0 + \Delta_0$); ($E'_0 + \Delta'_0$); ($E'_0 + \Delta_0 + \Delta'_0$)	$\Gamma'_{25} \rightarrow \Gamma'_{15}$	M_0	3,2 [5a, 5b, 13] 3,23 [7]	3,3 [7] 3,7 [13] 3,5 [5a]
	E_2	$X_4 \rightarrow X_1$	M_1	4,2 [5b] 4,3 [13] 4,45 [5a]	4,4 [13] 4,5 [5a]
	E_2	$\Sigma_4 \rightarrow \Sigma_1$	M_2	4,4 [5b]	
E	E_2	beide	$M_1 + M_2$	4,42 [7]	4,37 [7]
F (3)	E'_1 ; ($E_1 + \Delta_1$)	$L'_3 \rightarrow L_3$	M_3	5,7 [5b, 13] 6,0 [7](4) 5,9 [5a]	5,5 [5a, 13]
	Δ_0	Γ'_{25}		0,29 [13] 0,309 [7] 0,3 [aus p- Bande]	0 [7] 0,07 [aus p- Bande]
	Δ_1	L'_3		0,2 [13] 0,233 [7]	0,07 [7]
	Δ'_0	Γ_{15}		0,135 [7]	0 [7]

(beim M_3 -Übergang: endet), entnehmen. Dieser Absorptionsbereich hört entweder beim größten (kleinsten) Abstand der beteiligten Bänder auf oder findet seine Begrenzung, wenn innerhalb der Brillouin-Zone zwischen beiden Bändern eine weitere Singularität auftritt, die dann ein „eigenständiges“ Absorptionsgebiet begründet. Bei Ge und Si ist letzteres z. B. beim Λ -Punkt und beim Σ -Punkt der Fall. Für den einzelnen Absorptionsbereich reduziert sich deswegen die Breite der ins Auge gefaßten spezifischen Interbandanregung im k -Raum auf etwa $1/3$ der maximalen Ausdehnung der 1. Brillouin-Zone.

Für die fünf hier auftretenden Grundtypen M_i der auch in der Ge-Si-Mischkristallreihe prominenten Interbandübergänge wurden die nachfolgend angegebenen Spektraldarstellungen für den Imaginärteil des Suszeptilitätsbeitrages verwendet. Die darin

Tabelle 1:

Zusammenstellung der relevanten optischen Interbandübergänge zur Fundamentalabsorption von Germanium und Silizium. Kennung, Bezeichnung, Notation zur Lage des Überganges im k -Raum und van-Hove-Typus der Singularität der kombinierten Zustandsdichte dienen der näheren Definition des Überganges. Die eingetragenen Energiewerte für die zur kritischen Energiedistanz gehörigen Photonenenergien in den Spalten 5 und 6 sind in [eV] angegeben. Die letzten drei Zeilen geben Energiewerte für die durch Spin-Bahn-Kopplung abgespaltenen Teilbänder an. – Die eckigen Klammern [] verweisen auf die zitierte Literatur. In runden Klammern () wird auf die getrennt aufgeführten Bemerkungen zur Tabelle 1 verwiesen.

Bemerkungen zur Tabelle 1

- 1) Die einzelnen Interbandübergänge, gekennzeichnet innerhalb des Bändermodells nach internationaler Vereinbarung, werden hier der kürzeren Schreibweise wegen mit den Buchstaben IN, A, B, ... angesprochen.
- 2) Der indirekte, d. h. phononenunterstützte Interbandübergang findet bei Ge und Si in unterschiedlicher Richtung im k -Raum statt. Er bildet in beiden Fällen den langwelligsten Ausläufer der sogen. Fundamentalabsorption der Interbandanregung.
- 3) Das durch Spin-Bahn-Kopplung energetisch etwas abgesenkte Valenzband liegt als „drittes Valenzband“ um die Distanz Δ_0 unterhalb der beiden anderen Valenzbänder. Dementsprechend existiert beim Übergang „A“ eine um den angesprochenen Energiewert zu höheren Photonenenergien verschobene Schwellenergie für die Interbandanregung. Experimentell macht sich dieser Umstand i. allg. jedoch nur in einer quantitativ geringen Feinstruktur bzw. in einer geringfügigen energetischen „Versmierung“ des ins Auge gefaßten Absorptionseinsatzes bemerkbar. – Analoge Bandaufspaltungen durch Spin-Bahn-Kopplung liegen auch an anderen Stellen im k -Raum vor und wirken sich z.B. auch bei den Übergängen „C“, „D“ und „F“ aus.
- 4) Nach [7, 11] liegt eine nahezu lineare Variation der energetischen Distanz mit dem Zusammensetzungsparameter x innerhalb der Ge-Si-Mischkristallreihe vor. Es kommt dabei zu einem „level crossing“ zwischen den kritischen Energiedifferenzen für die Interbandübergänge „A“ und „C“. Nimmt man eine lineare Funktion $f(x)$ in beiden Fällen an, so tritt Gleichheit der Energiedistanzen bei $x = 0,619$ bzw. bei 2,905 eV ein. Legt man die schwach superlineare Variation der Distanz des Überganges „C“ nach [11] zugrunde, so tritt die Gleichheit bei $x = 0,623$ bzw. bei 2,917 eV auf.
- 5) Die Einsatzschwellen der Übergänge „C“ und „D“ fallen bei Si praktisch zusammen.

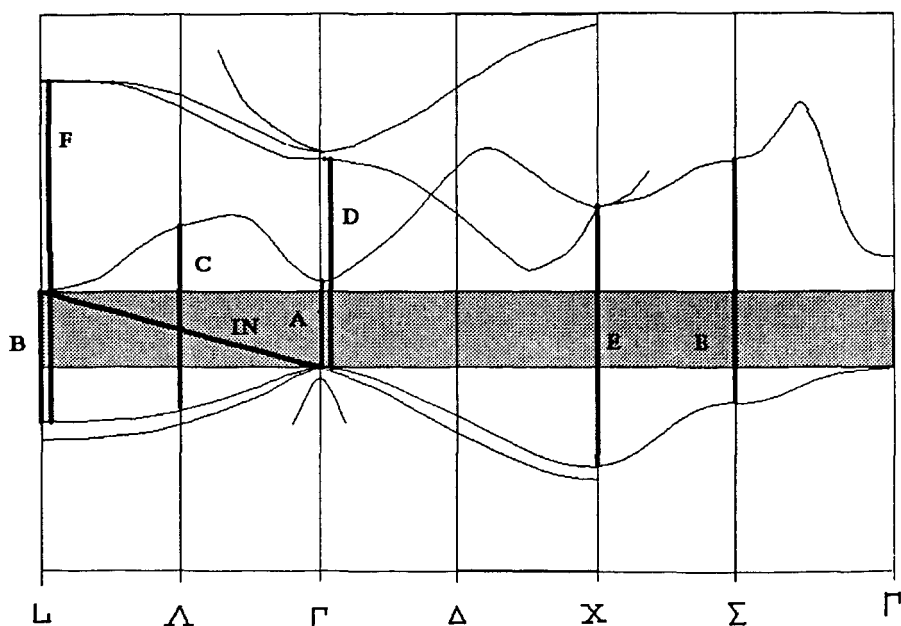


Abb. 2:

Schematische Darstellung des Bändermodells der Diamant-Struktur.

In das Diagramm der Elektronenenergie als Funktion der Ortskoordinate im Impulsraum sind eingetragen die sieben in der vorliegenden Arbeit berücksichtigten Interbandübergänge zur Modellbildung der komplexen dielektrischen Funktion. – Die bei den Übergängen angetragenen Buchstaben IN, A, B, ... F dienen der verkürzten Kennzeichnung („Kennung“) und finden ihre nähere Erläuterung durch Tab. I

enthaltenen Individualparameter gewährleisten die quantitative Anpassungsmöglichkeit für den jeweils betrachteten Übergang.

Eine zusätzliche Frage ist der Grad der Variation dieser Parameter innerhalb einer Mischkristallreihe, d. h. der Grad der Abhängigkeit der „Linienparameter“ vom Zusammensetzungsverhältnis des Kristalls. Auf die lineare und gegebenenfalls nichtlineare Darstellung dieser Abhängigkeit wird im Abschnitt III.4 näher eingegangen.

b) Einzelfunktionen für $\Delta\epsilon''(M_i, E)$

1. Indirekter M_0 -Übergang

Bei dem M_0 -Typus der van-Hove-Singularität existiert ein absolutes dreidimensionales Minimum des energetischen Abstandes der beiden Bänder. Liegen die beiden Bandextrema bei unterschiedlichen Elektronenimpulswerten in der Brillouin-Zone, so kann ein optischer Übergang jedoch nur unter Phononenbeteiligung zum Impulsausgleich, also „indirekt“, stattfinden. Die dabei überbrückte energetische Minimaldistanz

sei mit $E_{0, \text{IN}}$ bezeichnet. Die bei dem indirekten Übergang beteiligte Phononenenergie E_{Phonon} tritt zweifach auf: zunächst bei dem Anregungsprozeß unter Phononenemission und, sofern der Phononenzustand infolge hinreichender Temperatur entsprechend stark besetzt ist, dann auch unter Phononenabsorption. Sowohl der Übergang unter Phononenemission als auch der Übergang unter Phononenabsorption liefert eine theoretische Spektralfunktion des Anteils am Imaginärteils der dielektrischen Suszeptibilität, die mit der Schwellenergie E_S

$$E_S = (E_{0, \text{IN}} + E_{\text{Phonon}}) \text{ bzw. } = (E_{0, \text{IN}} - E_{\text{Phonon}}) \quad (\text{Gl. 5})$$

einsetzt.

Es können auch mehrere Phononen unterschiedlicher Quantenenergie beteiligt sein, soweit sie alle die notwendige Impulsänderung für das anzuregende Elektron liefern. Es treten dann mehrere diskrete Paare von Schwellenergien E_S auf.

Bei der theoretischen Ableitung der sich ergebenden Spektralfunktionen ist ferner zwischen „erlaubten“ und „verbotenen“ Übergängen zu unterscheiden.

Nach [5c] hat sich bei Ge empirisch ergeben, daß beide Äste der optischen Absorption, also sowohl bei Phononenabsorption und als auch bei Phononenemission, proportional zur 1,5-fachen Potenz der Differenz $(E - E_S)$ ansteigen. Da im vorliegenden Fall alle u. U. beteiligten Phononenenergien klein sind gegen den minimalen Bandabstand, erscheint es als eine hinreichend gute Näherung, die Phononenenergien in der Modelldarstellung zu vernachlässigen und einen summarischen Spektralverlauf proportional

zu $(E - E_{0, \text{IN}})^{1,5}$ anzusetzen. Für $\Delta\epsilon''(M_{0, \text{IN}}, E)$ tritt noch generell der Faktor $1/E^2$ hinzu.

Faßt man auf diese Weise die Äste der indirekten Interbandanregung zusammen, so bleibt ferner auch außer Betracht, daß bei den Anregungsprozessen unter Phononenabsorption bei Beteiligung mehrerer Phononensorten die Zustände der Phononen höherer Quantenenergie im Sinne der Bose-Einstein-Verteilung eine geringere Besetzungswahrscheinlichkeit besitzen.

Nach dem Absorptionsanstieg oberhalb von $E_{0, \text{IN}}$ als Folge der spektralen Funktion der kombinierten Zustandsdichte setzt schließlich wieder ein Absorptionsabfall ein, denn einerseits nimmt mit der größeren energetischen Distanz die Übergangswahrscheinlichkeit kontinuierlich ab, andererseits sinkt die zu berücksichtigende Funktion der kombinierten Zustandsdichte wieder auf Null, wenn die maximale energetische Differenz zwischen den beiden Bändern bzw. die effektive energetische Breite des Absorptionsbereichs erreicht ist. In der Modell-Spektralfunktion wird deshalb multiplikativ die oben bereits diskutierte „Fermi-Abschneidefunktion“ angesetzt, wobei die charakteristische Halbwertsenergie $(E_0 + BF)$ mit der oberen Grenze der hier wirksamen Photonenenergie für diesen Übergang korrespondiert. Der Parameter TF bestimmt die Steilheit des Abfalls. Beim Energiewert $(E_0 + BF + TF)$ beträgt der Wert der Abfallfunktion etwa 0,25.

Ein Faktor A als Proportionalitätsfaktor dient ferner der Anpassung der Größe des gesamten spektralen Suszeptibilitätsbeitrages und stellt die Dimension richtig.

Insgesamt wird also für den Suszeptibilitätsbeitrag für den indirekten M_0 -Übergang die folgende Spektralfunktion verwendet:

$$\begin{aligned} \text{a) für } E < E_{0,IN} \text{ ist} \\ -\Delta\epsilon''(M_{0,IN}, E) &= 0 \\ \text{b) für } E \geq E_{0,IN} \text{ ist} \\ -\Delta\epsilon''(M_{0,IN}, E) &= A \cdot (E_{0,IN}/E)^2 \cdot (E - E_{0,IN})^{1,5} \cdot \\ &\quad \cdot \{\exp[+(E - E_{0,IN} - BF)/TF] + 1\}^{-1}. \end{aligned} \quad (\text{Gl.6})$$

Der Spektralverlauf des Imaginärteilbeitrages zur DK in dem durch den erlaubten indirekten M_0 -Übergang gegebenen Absorptionsbereich wird also modellmäßig durch vier Individualparameter bestimmt: $E_{0,IN}$, A , BF und TF .

Der Spektralanteil für den erlaubten indirekten Interbandübergang bei einer M_0 -Singularität, d. h. hier für die Funktion $-\Delta\epsilon''(M_{0,IN}, E)$, ist in Abb. 3 zur Veranschaulichung typisiert dargestellt.

Bei der Beurteilung dieses Suszeptibilitätsbeitrages ist zu berücksichtigen, daß dieser aufgrund der relativ geringen Übergangswahrscheinlichkeit bei dem phononenassistierten Übergang („Dreierstoß“) quantitativ relativ klein ist im Vergleich mit dem eines direkten Interbandüberganges, bei dem nur Photon und Elektron in einem „Zweierstoß“ wechselwirken.

Der hier betrachtete indirekte Übergang leitet jedoch, wenn man mit kleinere Photonenenergien als $E_{0,IN}$ beginnt, sowohl bei Germanium als auch bei Silizium die jeweilige Fundamentalabsorption ein. Dieser indirekte Übergang bildet also die langwelligste Absorptionskante und ist, da alle direkten Übergänge erst bei höheren Photonenenergien folgen, experimentell gut meßbar. Darüberhinaus bestimmt dieser indirekte Übergang doch noch deutlich die Hochfrequenz-DK im langwelligen Transparenzbereich bzw. die statische DK dieser Materialien der Mischkristallreihe mit, so daß er bei der Berechnung des Realteils der DK nicht außer Betracht gelassen werden kann.

2. Direkter M_0 -Übergang bzw. M_3 -Übergang

Für den direkten (also ohne Phononenbeteiligung erfolgenden), erlaubten Interbandübergang vom Typus der M_0 -Singularität liefert die quantentheoretische Rechnung aufgrund des spektralen Verlaufs der kombinierten Zustandsdichte (s. Abb. 1) in der Nähe von E_0 einen Spektralverlauf des Beitrages zum Imaginärteils der DK von der Form

$$\begin{aligned} -\Delta\epsilon''(M_0, E) &= \text{const} \cdot (E_0/E) \cdot (E - E_0)^{1/2} \\ \text{für } E \geq E_0, \end{aligned} \quad (\text{Gl. 7})$$

der mit der Photonenenergie $E = E_0$ einsetzt.

Zur Darstellung des realen Verlaufs über den gesamten Spektralbereich, der aus einem derartigen Interbandübergang resultiert, werden die beiden folgenden Ergänzungen eingeführt:

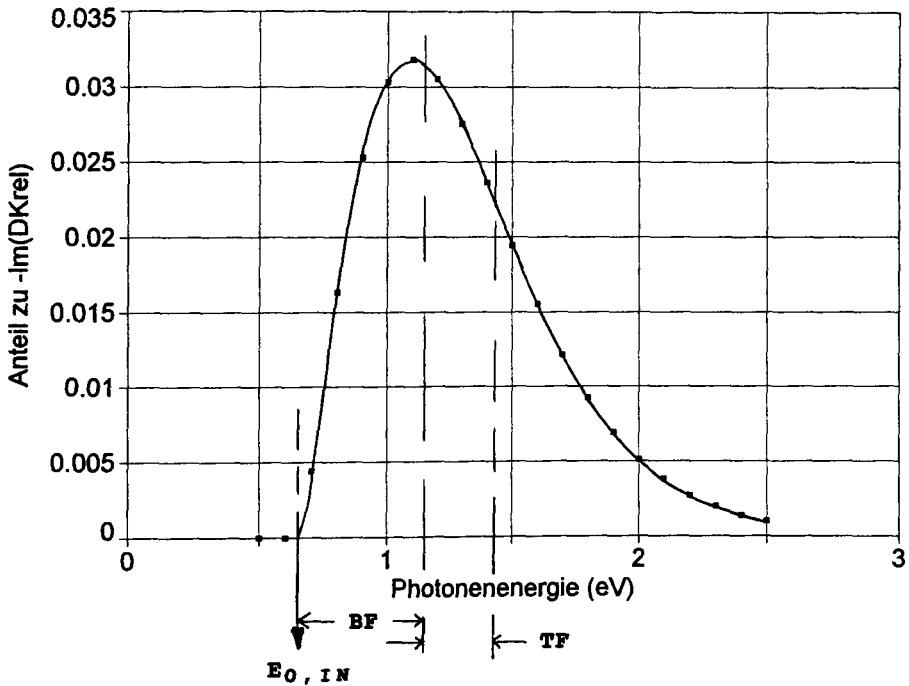


Abb. 3:

Typisierte Darstellung des spektralen Verlaufs des Imaginärteilbeitrages des indirekten Interbandüberganges „IN“ (Typus M_0) zur komplexen relativen Dielektrizitätskonstanten. Der Verlauf ist in Gl. 6 analytisch angegeben, womit auch die inhärenten Individualparameter definiert sind.

Für die gezeigte Kurve gelten die Parameter: $E_0 = 0,65$; $BF = 0,5$; $TF = 0,3$; $A = 0,5565$.

1. Ein Faktor in der Form der Fermi-Abschneidefunktion berücksichtigt die endliche Breite des spektralen Übergangsgebietes, d. h. liefert das **sigmoide Abklingen**, wenn sich E der maximalen Übergangsenergie E_0 nähert.
2. Der der Absorptionskante vorgelagerte Absorptionsausläufer („**Urbach-Ausläufer**“) wird durch eine zusätzliche Absorption berücksichtigt, die von E_0 aus zu kleineren Energien hin in der Form einer Exponentialfunktion abfällt. Die Positionierung der Exponentialfunktion relativ zur Wurzelfunktion des Anstiegs erfolgt mittels des Parameters $R \neq 0$ so, daß sich bei $E = E_0$ für die beiden Teilfunktionen der spektralen Darstellung der gleiche Wert und eine endliche, sowie von links und rechts gleich große Steigung ergibt. Beide Bedingungen legen den Relaxationsparameter TE der Exponentialfunktion eindeutig fest.

Die unter 2. gegebene Einbeziehung des exponentiellen Kantenausläufers in die Spektraldarstellung ist so erfolgt, daß die Funktion überall stetig ist und sich überall die

Steigungen nur stetig ändern. Der Spektralverlauf ist also überall „glatt“. Andererseits bleibt insbesondere für kleine R-Werte der theoretisch begründete Verlauf der Absorptionskante in seiner Charakteristik erhalten.

Für die numerische Berechnung gelten damit die folgenden beiden Gleichungen:

a) für $E < E_0$ gilt:

$$-\Delta\epsilon''(M_0, E) = A \cdot (E_0/E) \cdot W \cdot \exp[-(E_0 - E)/TE]$$

$$\text{mit } W = (R)^{1/2} \cdot [\exp(-BF/TF) + 1]^{-1} \text{ und}$$

$$1/TE = 1/(2 \cdot R) - (1/TF) \cdot [\exp(+BF/TF) + 1]^{-1} \quad (\text{Gl. 8a})$$

b) für $E \geq E_0$ gilt: $-\Delta\epsilon''(M_0, E)$

$$= A \cdot (E_0/E) \cdot [E - E_0 + R]^{1/2} \cdot \{\exp(E - E_0 - BF)/TF + 1\}^{-1} \quad (\text{Gl. 8b})$$

Insgesamt treten damit zur Anpassung eines „Absorptionsgebietes“ dieser Art, d.h. zur Modelldarstellung des entsprechenden Beitrages zum Imaginärteil der DK fünf Individualparameter auf: E_0 , A, R, BF und TF.

Zur Veranschaulichung des gesamten spektralen Verlaufs beim direkten M_0 -Übergang ist in Abb. 4 eine typisierte Darstellung von $-\Delta\epsilon''(M_0, E)$ gegeben.

Bei einem kritischen Punkt vom M_3 -Typ liegt ein dreidimensionales Maximum des Bandabstandes mit dem Wert E_0 vor und die kombinierte Zustandsdichte verläuft, bezogen auf die kritische Energie E_0 , bis auf den Faktor E_0/E spiegelbildlich zu der eines M_0 -kritischen Punktes (vergl. Abb. 1). Dementsprechend wird hier für den Fall eines erlaubten direkten M_3 -Überganges das spiegelbildliche Modellspektrum zu dem des M_0 -Überganges in der folgenden Form verwendet:

a) für $E \geq E_0$ gilt: $-\Delta\epsilon''(M_3, E)$

$$= A \cdot (E_0/E) \cdot [E_0 + R - E]^{1/2} [\exp(E_0 - BF - E)/TF + 1]^{-1} \quad (\text{Gl. 9a})$$

b) für $E \geq E_0$ gilt: $-\Delta\epsilon''(M_3, E) = A \cdot (E_0/E) \cdot W \cdot \exp[(E_0 - E)/TE]$

$$\text{mit } W = (R)^{1/2} \cdot [\exp(-BF/TF) + 1]^{-1} \text{ und}$$

$$1/TE = 1/(2 \cdot R) - (1/TF) \cdot [\exp(+BF/TF) + 1]^{-1} \quad (\text{Gl. 9b})$$

3.) Direkter M_1 -Übergang bzw. M_2 -Übergang

Beim M_1 -Typus der Singularität der kombinierten Zustandsdichte zweier Bänder liegt eine spezielle Art von Sattelpunkt der Energieflächen vor: In zwei Richtungen im Impulsraum des Kristalls existiert ein Minimum bei der Energiedistanz E_0 , während in der dritten Richtung ein Maximum besteht. Die kombinierte Zustandsdichte als Funktion der wachsenden energetischen Distanz E hat die Form eines wurzelförmigen konkaven Anstiegs mit Übergang in ein Quasiplateau beim Erreichen von E_0 (vergl. Abb. 1).

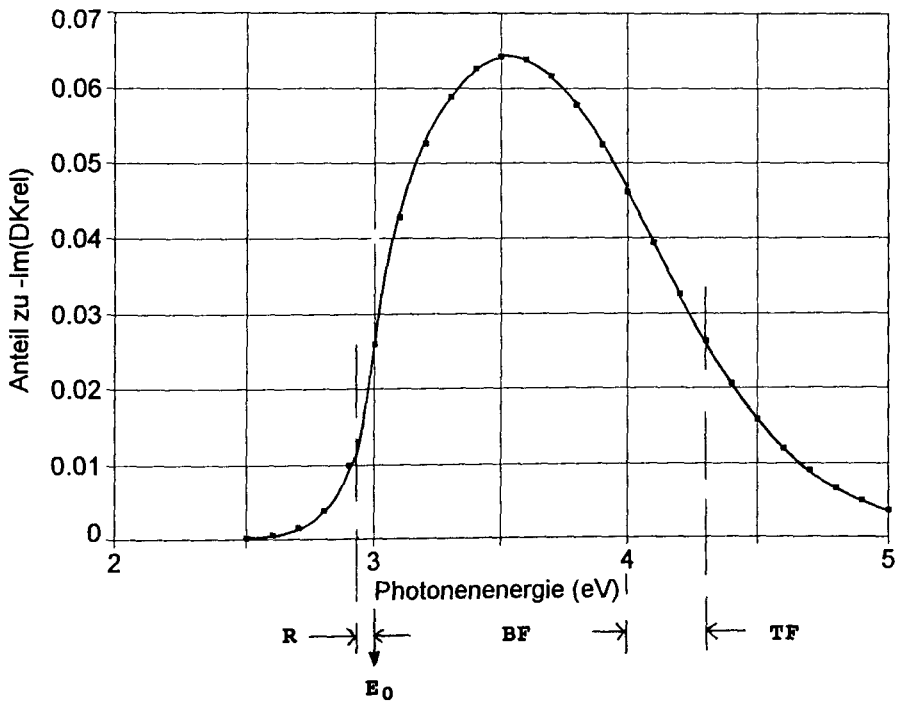


Abb. 4:

Typisierte Darstellung des spektralen Verlaufs des Imaginärteilbeitrages des direkten Interbandüberganges „A“ (Typus M_0) zur komplexen relativen Dielektrizitätskonstanten.

Der Verlauf ist in Gl. 8 analytisch angegeben, womit auch die inhärenten Individualparameter definiert sind. Für die gezeigte Kurve gelten die Parameter: $E_0 = 3,0$; $R = 0,05$;

$BF = 1,0$; $TF = 0,3$; $A = 0,12$. – Analog gilt diese Spektralform für die Übergänge „B“ und „D“, sowie entsprechend, d. h. an der kritischen Energie E_0 „gespiegelt“, auch für den Übergang „F“ (Typus M_3) gemäß Gl. 9.

Das sich in der Theorie mit einem Knick darstellende Übergangsgebiet zwischen dem Spektralteil $E \geq E_0$ und $E < E_0$ muß zur Wiedergabe realer Spektren zunächst verundet werden. Zu diesem Zweck wird ein „inneres“ Tailing eingeführt, d. h. der Übergang in den konstanten Plateaubereich erfolgt komplementär exponentiell, während die Steigung „unendlich“ in der Wurzelfunktion wieder dadurch vermieden wird, daß der komplementär-exponentielle Anstieg nach Maßgabe des Parameters R vorverlegt wird. Damit liegt jetzt der Wendepunkt der Spektralfunktion bei der Schwellenergie E_0 . – Die Modellkonstruktion folgt in diesem Fall also dem Vorgehen beim M_0 -Übergang (siehe oben).

Die endliche spektrale Breite des gesamten Übergangsgebietes wird bezüglich des Absorptionseinsatzes und -abfalles beidseitig von der kritischen Energie E_0 durch eine je spezifische Abschneidefunktion in der Form der Fermifunktion berücksichtigt.

Damit stellt sich die Spektralfunktion des Imaginärteils des Suszeptibilitäts- bzw. DK-Beitrages des M_1 -Überganges modellmäßig wie folgt dar:

$$\begin{aligned} \text{a) für } E \leq E_0: \quad -\Delta\epsilon''(M_1, E) &\equiv y_a & (\text{Gl. 10a}) \\ &= A \cdot (E_0/E) \cdot [1 - (E_0 + R)^{-1/2} \cdot (E_0 + R - E)^{1/2}] \cdot [\exp((E_0 - BN - E)/TN) + 1]^{-1} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{b) für } E \geq E_0: \quad -\Delta\epsilon''(M_1, E) &\equiv y_b \\ &= A \cdot (E_0/E) \cdot [\exp(-BH/TH) + 1] \cdot \{W + [R/(E_0 + R)]^{1/2} \cdot \\ &\quad \cdot [1 - \exp((E_0 - E)/TE)]\} \cdot \{\exp[(E - E_0 - BH)/TH] + 1\}^{-1} \end{aligned} \quad (\text{Gl. 10b})$$

Die geforderte Gleichheit der Funktionswerte bei $E = E_0$:

$$y_a(E = E_0) = y_b(E = E_0)$$

liefert die Größen W und TE zu:

$$\begin{aligned} W &= [1 - [R/(E_0 + R)]^{1/2}] \cdot [\exp(-BN/TN) + 1]^{-1} \quad \text{und} \\ 1/TE &= 1/(2 \cdot R) \cdot [\exp(-BN/TN) + 1]^{-1} \\ &\quad + \{[(E_0 + R)/R]^{1/2} - 1\} \cdot (1/TN) \cdot \exp(-BN/TN) \cdot [\exp(-BN/TN) + 1]^{-2} \\ &\quad + [(E_0 + R)/R]^{1/2} \cdot W \cdot (1/TH) \cdot \exp(-BH/TH) \cdot [\exp(-BH/TH) + 1]^{-1} \end{aligned}$$

Der Relaxationsparameter TE der Exponentialfunktion ist auch in diesem Fall intern bestimmt aufgrund der Bedingung, daß bei E_0 die Steigungen beider Spektralteile y_a und y_b gleich sein müssen.

Der Suszeptibilitätsbeitrag für diesen Band-Band-Übergang wird auf diese Weise durch sieben Individualparameter bestimmt: E_0 , A , BN , TN , BH , TH und R . Dabei beziehen sich BN und TN nur auf den Spektralbereich $E \leq E_0$ bzw. BH und TH nur auf den Bereich mit $E > E_0$.

Die energetischen Abstände BN und BH bestimmen die spektrale Haltwerlagslage der Abschneidefunktionen und erlauben es z. B., bei relativ großen Beträgen von BN und BH das theoretische Spektrum in der Nähe von E_0 unverändert in der charakteristischen (hier jedoch verrundeten) Form in Erscheinung treten zu lassen.

Es ist darauf hinzuweisen, daß in Gl. 10a) der Faktor $[1 - (E_0 + R)^{-1/2} \cdot (E_0 + R - E)^{1/2}]$, der den konkaven Anstieg bei wachsender Photonenenergie für $E < E_0$ enthält, so normiert ist, daß er für $0 < E < E_0$ nicht negativ werden kann. Damit beginnt der Anstieg bereits bei so kleinen Photonenenergien, daß die Einführung eines „Abschneidefaktors“ auch auf der niederenergetischen Seite von E_0 notwendig erscheint.

Beim M_2 -Typus des kritischen Punktes ist die Sattelpunkt-Struktur der Bänder gewissenmaßen umgekehrt: In nur einer Impulsrichtung liegt ein Minimum des Bandabstandes vor, während es sich in den beiden anderen Richtungen um ein Maximum handelt. Die kombinierte Zustandsdichte verläuft im Vergleich zum Fall der M_1 -Singularität „gespiegelt“ an der Minimumsenergie (vergl. Abb. 1). Dementsprechend wird der

Spektralverlauf des imaginären Suszeptilitätsanteils modellmäßig durch die entsprechend gespiegelte Funktion dargestellt:

$$\begin{aligned} \text{für } E < E_0: \quad -\Delta\epsilon''(M_2, E) &\equiv y_a \\ &= A \cdot (E_0/E) \cdot [1 + e^{-BN/TN}] \cdot [W + (R/E_0)^{1/2} \cdot (1 - e^{-(E_0-E)/TE})] \cdot [e^{+(E-BN-E)/TN} + 1]^{-1} \end{aligned} \quad (\text{Gl. 11a})$$

$$\begin{aligned} \text{für } E \geq E_0: \quad \Delta\epsilon''(M_2, E) &= y_b \\ &= A \cdot (E_0/E) \cdot \{1 - (1/E_0)^{1/2} \cdot [E - E_0 + R]^{1/2} \cdot [e^{+(E-E_0-BH)/TH} + 1]^{-1}\} \end{aligned} \quad (\text{Gl. 11b})$$

Dabei wird, vgl. oben, die Größe W in Gl. 11a abgeleitet aus der geforderten Gleichheit der y -Werte der Teile a) und b) bei E_0 zu:

$$W = \{1 - (R/E_0)^{1/2}\} \cdot [e^{-BH/TH} + 1]^{-1}.$$

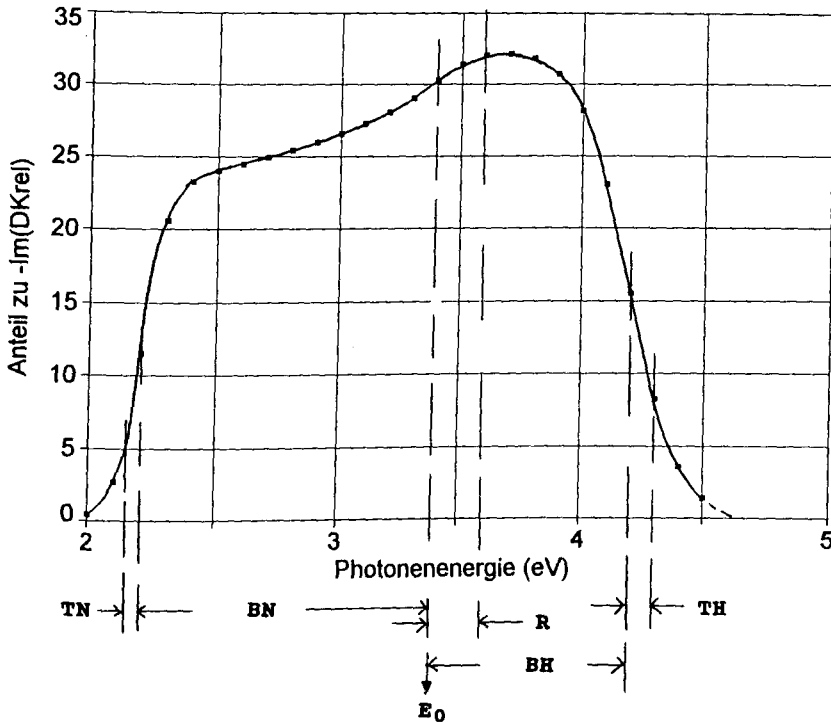


Abb. 5:

Typisierte Darstellung des spektralen Verlaufs des Imaginärteilbeitrages des direkten Interbandüberganges „C“ (Typus M_1) zur komplexen relativen Dielektrizitätskonstanten.

Der Verlauf ist in Gl. 10 analytisch angeben, womit auch die inhärenten Individualparameter definiert sind. Für die gezeigte Kurve gelten die Parameter:

$$E_0 = 3,4; R = 0,2; BN = 1,2; BH = 0,8; TN = 0,05; TH = 0,1; A = 39,59.$$

Diese Spektralform gilt entsprechend, d. h. an der kritischen Energie E_0 „gespiegelt“, auch für einen Übergang vom Typus M_2 gemäß Gl. 11.

Entsprechend wird auch hier die Größe TE in Gl. 11a abgeleitet aus der Bedingung der Gleichheit der Steigungen der Teilfunktionen y_a und y_b bei E_0 .

Der hier aufgeführte Spektralanteil beim Imaginärteil der DK für den Absorptionsbereich beim M_1 -Übergang, d. h. die Funktionen $-\Delta\epsilon''(M_1, E)$ ist in Abb. 5 zur Veranschaulichung in typisierter Form dargestellt.

4. Direkter M_1 -Übergang in Nachbarschaft zu einem M_2 -Übergang

Liegt eine M_1 -Singularität energetisch gesehen relativ dicht unterhalb einer M_2 -Singularität, so enthält die sich ergebende kombinierte Zustandsdichte ein relativ schmalbandiges Maximum bei

$$E_0 = (E_{0,M2} - E_{0,M1})/2$$

und der sich damit ergebende Imaginärteil des Suszeptibilitätsbeitrages ähnelt in seinem spektralen Verlauf einer klassischen Absorptionsbande, d. h. einer Lorentz-Linie. Bei Silizium und Germanium ist dies so beim sogen. E_2 -Übergang gegeben, der einerseits in der Brillouin-Zone am X-Punkt und andererseits am Σ -Punkt bei fast gleicher Photonenenergie stattfindet (vergl. Abb. 2 und Tabelle 1). In einem solchen Fall liegt es nahe, den diesbezüglichen komplexen Suszeptibilitätsbeitrag zur komplexen DK modellmäßig mit Hilfe eines harmonischen Oszillators entsprechender Resonanzenergie und Dämpfung darzustellen. Eine derartige Näherung wurde in engeren Spektralbereichen z. B. von [8] erfolgreich zum Einsatz gebracht.

In der vorliegenden Modelldarstellung wird diese Form der Näherung übernommen, jedoch in zweifacher Weise ergänzt. Um eine bessere Anpassung an den experimentell gegebenen Spektralverlauf insbesondere in größeren Abständen von E_0 zu erreichen, wird

- eine unsymmetrische Dämpfung eingeführt, die berücksichtigt, daß die Spektralform der kombinierten Zustandsdichte unterhalb und oberhalb von E_0 nicht spiegelbildlich gleich ist, sowie
- der Abfall des Imaginärteils der DK gegenüber dem des harmonischen Oszillators auf beiden Seiten des Absorptionsmaximums durch Multiplikation mit einer je spezifischen „Fermi-Abschneidefunktion“ verstärkt.

Für $-\Delta\epsilon''(M_{1,2}, E)$ wird damit folgende Funktion angesetzt:

$$\begin{aligned} \text{(a) für } E \leq E_0: -\Delta\epsilon''(M_{1,2}, E) &= & \text{(Gl. 12)} \\ &= A \cdot \{ \exp[(E_0 - BN - E)/VN] + 1 \}^{-1} \cdot \{ E \cdot TN / [(E_0^2 - E^2)^2 + (E \cdot TN)^2] \} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{(b) für } E > E_0: -\Delta\epsilon''(M_{1,2}, E) &= \\ &= A \cdot C \cdot \{ \exp[(E - E_0 - BH)/VH] + 1 \}^{-1} \cdot \{ E \cdot TH / [(E_0^2 - E^2)^2 + (E \cdot TH)^2] \} \end{aligned}$$

$$\text{mit } C = \{ TH \cdot [\exp(-BH/VH) + 1] \} \cdot \{ TN \cdot [\exp(-BN/VN) + 1] \}^{-1}.$$

Mittels des Faktors C im Fall b) ist gewährleistet, daß der Suszeptibilitätsbeitrag beim Durchlaufen von $E = E_0$ keinen Sprung erfährt.

Es sei darauf hingewiesen, daß in Gl. 12a) bzw. Gl. 12b) der Faktor in der Form

$$\{E \cdot T / [(E_0^2 - E^2)^2 + (E \cdot T)^2]\} \quad (\text{Gl. 13})$$

dem Spektralverlauf des Imaginärteilbeitrages eines klassischen harmonischen Oszillators mit der Dämpfungskonstanten T entspricht.

Die Modelldarstellung des spektralen Verlaufs von $\Delta\epsilon''(M_{1,2}, E)$ ist also neben den Werten E_0 und A in den beiden Spektralteilen $E \leq E_0$ bzw. $E > E_0$ durch jeweils drei zusätzliche Individualparameter bestimmt: BN, VN und TN bzw. BH, VH und TH.

Der Spektralbeitrag zum Imaginärteil der DK aus dem kombinierten M_1 - M_2 -Übergang, d. h. die Funktion $-\Delta\epsilon''(M_{1,2}, E)$, ist in Abb. 6 zur Veranschaulichung in typisierter Form dargestellt.

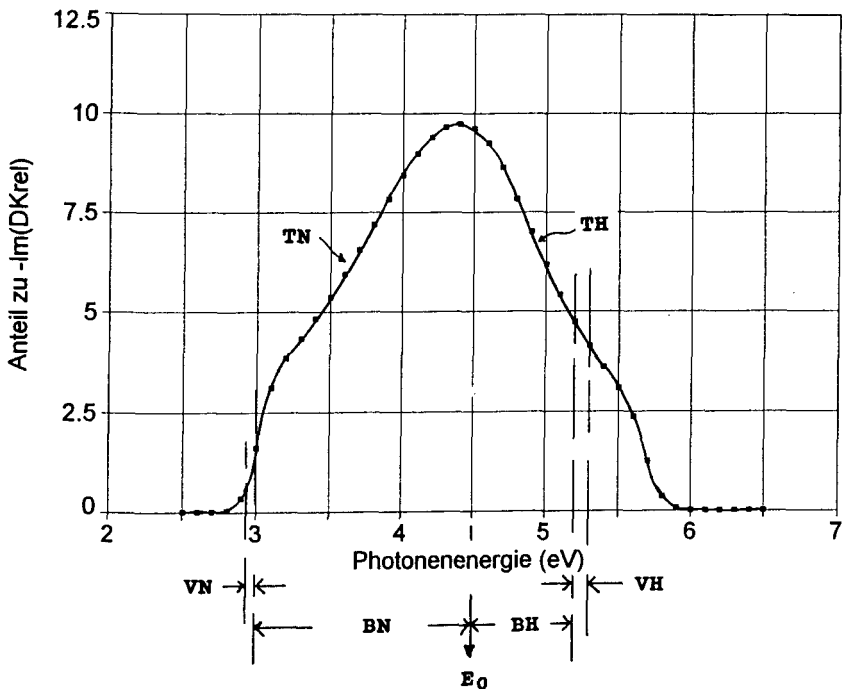


Abb. 6:

Typisierte Darstellung des spektralen Verlaufs des Imaginärteilbeitrages des direkten Interbandüberganges „E“ (kombinierter Typus $M_1 + M_2$) zur komplexen relativen Dielektrizitätskonstanten. Der Verlauf ist in Gl. 12 analytisch angegeben, womit auch die inhärenten Individualparameter definiert sind. Für die gezeigte Kurve gelten die Parameter: $E_0 = 4,5$; $BN = 1,5$; $BH = 1,2$; $TN = 2,0$; $TH = 1,5$; $A = 86,4$

Wenn die beiden Parameter BN und BH hinreichend große Werte besitzen, erscheint in der Nähe von E_0 eine klassische Absorptionsbande mit unsymmetrischer Dämpfung bzw. bei $TN = TH$ in unveränderter Form.

Für den Fall, daß die kritischen Energien $E_{0,M1}$ und $E_{0,M2}$ (mit $E_{0,M1} < E_{0,M2}$) eine größere Differenz besitzen, ergibt sich zwischen $E_{0,M1}$ und $E_{0,M2}$ ein breiteres, in der Mitte plateauartiges Gebiet für den Spektralverlauf der kombinierten Zustandsdichte. In diesem Fall wären bei Wegfall der „inneren“ Abschneidefunktionen die Spektraldarstellungen der reinen M_1 - und M_2 -Übergänge zu verwenden. Die Spektralwerte für die beiden Plateaubereiche der kombinierten Zustandsdichten sind dabei ferner durch eine geeignete Funktion approximativ ineinander überzuführen.

Es sei bemerkt, daß sowohl bei Si als auch bei Ge, und damit durchgängig in der Ge-Si-Mischkristallreihe, der durch diese E_2 -Übergangskombination dominierte Spektralbereich jeweils das absolute Maximum der Spektralfunktion des Imaginärteiles der DK enthält.

III Anpassungsergebnisse für den Imaginärteil der DK

III.1 Grundsätzliches

Die Modellanpassung für die Spektraldarstellung des Imaginärteils der DK der Ge-Si-Mischkristallreihe beginnt mit der Anpassung der verfügbaren Parameter an ein entsprechendes experimentelles Spektrum von Ge und Si. Derartige Spektren sind in der Literatur mehrfach vorgestellt und in einschlägige Datensammlungen (vergl. z. B. [15]) übernommen worden. Vergleicht man derartige Spektren untereinander, so findet man deutliche Abweichungen, die allerdings nur zu verständlich sind, denn die Bestimmung der komplexen Optischen Funktion an stark, in bestimmten Spektralbereichen sogar „metallisch“ absorbierenden Halbleitern ist schwierig. Entweder muß man vergleichsweise sehr dünne Schichten verwenden, um auch Transmissionswerte messen zu können, oder man muß ausschließlich auf ellipsometrische Reflexionsmessungen zurückgreifen. Beide Verfahren enthalten grundsätzliche und je spezifische Unsicherheiten. Hinzu kommt, daß die von den jeweiligen Autoren untersuchten Proben zueinander Unterschiede in ihrer Präparation und/oder Oberflächenbehandlung aufweisen.

Um eine Vorstellung dieser experimentell, d. h. meßtechnisch und/oder präparativ bedingten Unsicherheiten zu gewinnen, wurden die Spektren des Imaginärteils der DK von Ge nach D. E. Aspnes and A. A. Studna [9] („As“) und H. R. Philipp and H. Ehrenreich [10] („Ph“) im Spektralbereich von 1,5 eV bis 6 eV miteinander verglichen (siehe Abb. 7). Die vorliegenden Abweichungen lassen sich dadurch quantifizieren, daß man für die gegebenen 46 spektralen Stützstellen im Abstand von 0,1 eV die mittlere Differenz $D(\text{As-Ph})$ und die Standardabweichung $SDEV(\text{As-Ph})$ bestimmt. Bei einer mittleren Differenz $D(\text{As-Ph}) = 0,78$ ergibt sich der Wert $SDEV(\text{As-Ph}) = 2,16$.

Man wird daraus den Schluß zu ziehen haben, daß auch Modellanpassungen eine vergleichbare Abweichung zu anderen experimentellen Spektren haben werden bzw.

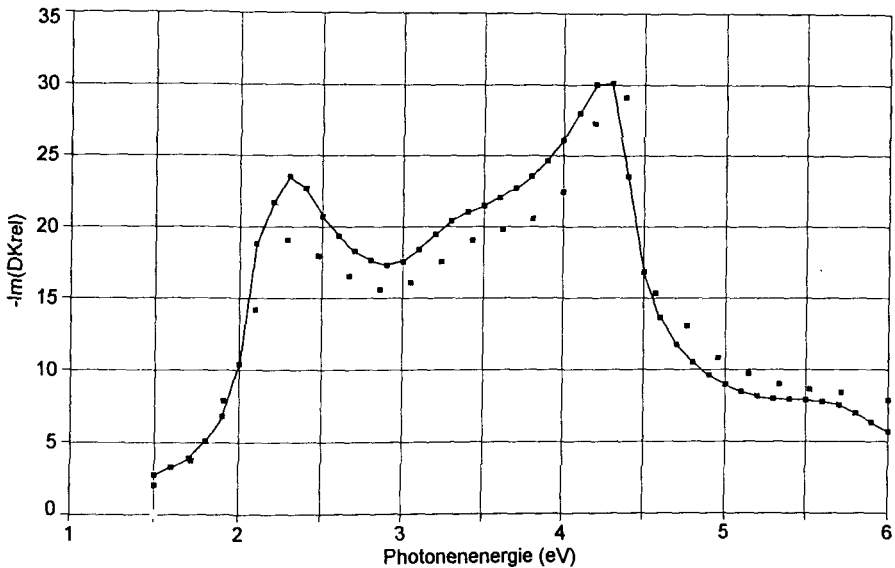


Abb. 7:

Spektralverlauf von $-Im(DK_{rel})$ von Germanium nach Messungen

a) von D. E. Aspnes et al. [9] (Meßpunkte verbunden) und b) von H. R. Philipp et al. [10] gültig für massives Material und Zimmertemperatur

die Anpassungsgenauigkeit, wenn sie denn im Einzelfall besser gelingt, nur auf den konkreten Fall bezogen werden kann.

Zur ergänzenden Information sei gesagt, daß die analoge Differenz der Spektralwerte bei der Gesamtvariation von Ge nach Si gemäß den Messungen von J. Humlíček et al. [11] bei den gleichen Stützstellen einen Mittelwert von $D(Ge-Si) = 1,68$ und dabei eine Standardabweichung $SDEV(Ge-Si) = 13,14$ ergibt. – Damit liegen gewissermaßen die „Eckwerte“ von mittlerer Abweichung und Standardabweichung zur Beurteilung einer „guten“ bzw. einer „schlechten“ Anpassung fest.

Da im vorliegenden Fall das Anpassungsergebnis mit dem gefundenen Parametersatz insbesondere die Variation des Imaginärteils der DK innerhalb der Ge-Si-Mischkristallreihe bei der Variation von $x \approx 0$ bis $x = 1$ wiedergeben soll, wurden die Messungen von J. Humlíček et al. [11] als Primär- bzw. Vergleichsspektren verwendet. Die Autoren teilen die Spektralwerte für neun etwa gleichabständige x -Werte von $x = 0$, d. h. reines Ge, und $x = 1$, d. h. reines Si, in tabellarischer Form mit. Die Tabellenform bietet den großen Vorteil einer Datensicherheit, die bei der alleinigen Präsentation von Graphen und der Entnahme von Zahlenwerten daraus nicht in diesem Maße gegeben ist.

Eine tabellarische Übersicht über publizierte Werte der Energieabstände zu den einzelnen Interbandübergängen bei Ge und Si ist oben bereits gegeben worden (siehe Tab. 1). Daraus lassen sich für die Anpassungsprozedur geeignete Startwerte für die kritischen Energiewerte E_0 entnehmen.

Mit Hilfe der oben beschriebenen Modellfunktionen wurde als erstes der Imaginärteil der relativen DK von Germanium in Anpassung an die experimentellen Daten dargestellt, indem die einzelnen Parameter entsprechend gewählt wurden. Dabei wurde nach „Augenmaß“ vorgegangen. Auf die Programmierung einer numerisch-automatischen Parameterbestimmung im Sinne der Lösung einer entsprechenden Optimierungsaufgabe wurde also bisher noch verzichtet, da zunächst die brauchbaren Spektraldarstellungen gefunden und eine Übersicht über das Erreichbare gewonnen werden sollten.

Bei der Vielzahl der Parameter erscheint eine Optimierung unter Benutzung des <Chi by Eye>-Kriteriums zunächst relativ aufwendig und von geringer Konvergenzgeschwindigkeit. Da aber die in der einschlägigen Literatur genannten Energiewerte für die Bandabstände bei den relevanten kritischen Punkten im k -Raum und die anhand des theoretisch berechneten Bändermodells von Germanium möglichen Abschätzungen für die Breite der Bänder als Startwerte verwendet wurden, so ist ein brauchbares Resultat doch schon nach relativ kurzer Zeit auch so erreicht worden.

III.2 Germanium

Die Abb. 8 zeigt im unmittelbaren Vergleich das Ergebnis der Anpassung für Ge (Anpassungsmodell „X3“). Als vorgebene, d. h. anzupassende Spektralfunktion von $-\text{Im}(\text{DK}_{\text{rel}}, E)$ wurden, wie oben begründet, die Meßwerte von [11] für $x = 0$ verwendet, die zum Vergleich in der Abbildung ebenfalls dargestellt sind.

Für den Mittelwert der verbliebenen Abweichungen zwischen dem experimentellen Spektrum („Exp“) und der Modelldarstellung („Mod“) gilt: $D(\text{Exp-Mod}) = 0,0545$ und für die Standardabweichung gilt: $\text{SDEV}(\text{Exp-Mod}) = 1,4574$. Die Anpassung kann damit als „befriedigend“ bezeichnet werden.

Die Abweichungswerte streuen in ihrer Spektralverteilung statistisch und wie das Histogramm der Abweichungen in Abb. 9a erkennen läßt, liegt näherungsweise eine Gauß-Verteilung vor, so daß sich der bereits aus Abb. 8 ergebende Eindruck verstärkt, daß eine weitergehende Optimierung der Parameterwahl kaum mehr eine verbesserte Übereinstimmung zwischen Modelldarstellung und experimentellem Befund ergeben wird. Schließlich können die verbliebenen Abweichungen ja auch auf statistisch streuenden experimentellen Ungenauigkeiten beruhen. Diesbezüglich geben die Autoren in [11] für ihre ermittelten DK-Werte eine Genauigkeit von (nur) 10 % an.

Bei den praktisch statistisch verteilten Differenzen treten erwartungsgemäß die größten Beträge an den spektralen Stellen auf, an denen eine starke Variation des Imaginärteils besteht. Eliminiert man – vergleichsweise je den größten positiven und negativen Abweichungswert aus der Statistik, so reduziert sich die Standardabweichung im vorliegenden Fall des Modells „X3“ auf den Wert $\text{SDEV}(\text{Exp-Mod}) = 1,2191$.

Abb. 9a zeigt als Detailerläuterung zu Abb. 8 in getrennter Darstellung die einzelnen spektralen Anteile der beteiligten 7 Übergänge. Die dazu gültigen Individualparameter sind in Tab. 2 angegeben. Diese Parameter, die im Sinne der je spezifischen Spektraldarstellung für den einzelnen Übergang mit den jeweiligen Bandparametern unmittelbar in Beziehung stehen, lassen eine direkte Interpretation zu, was den Verlauf der kom-

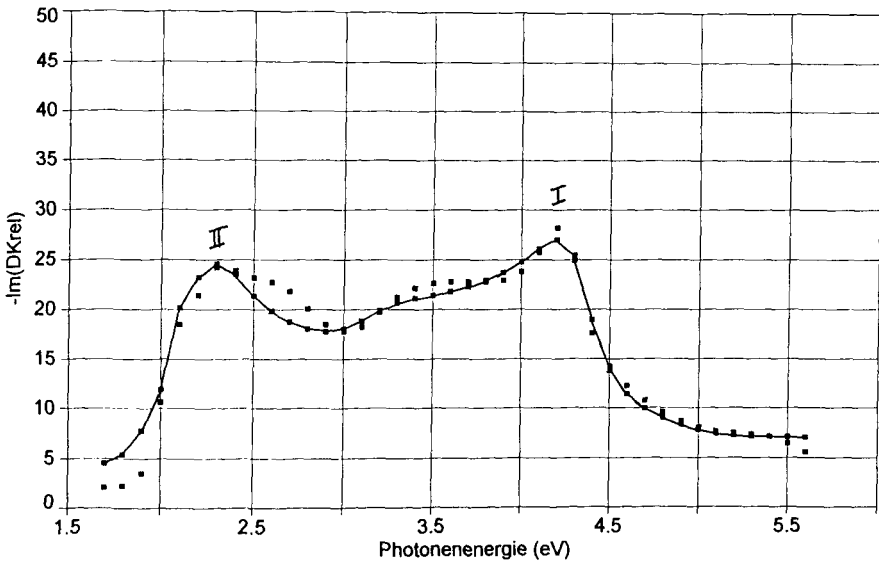


Abb. 8:

Spektralverlauf von $-\text{Im}(\text{DKrel})$ von Germanium

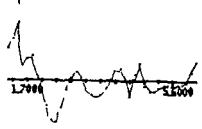
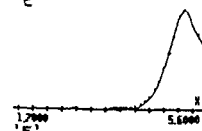
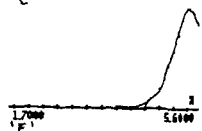
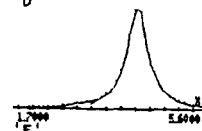
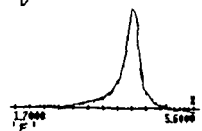
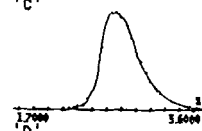
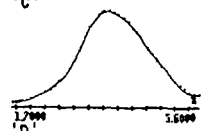
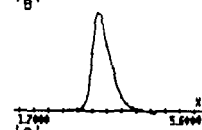
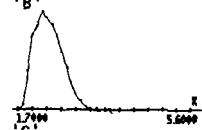
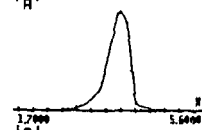
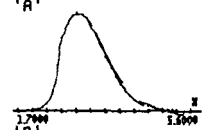
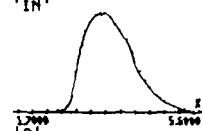
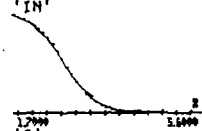
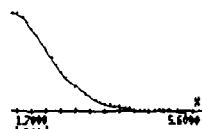
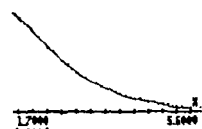
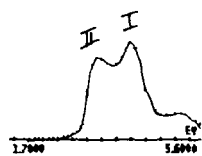
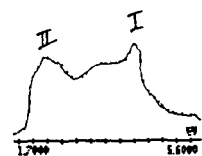
- a) Messungen nach J. Humlíček et al. [11] (Meßpunkte verbunden) und
b) nach Modellberechnung mit dem Parametersatz „X3“*

binieren Zustandsdichte, die Ausdehnung des konkreten Überganges im k -Raum, die tailing-Verbreiterungen etc. angeht. Die kritischen energetischen Abstände, die sich bei der Anpassung ergeben haben, sind in Tab. 3 den in Tab. 1 enthaltenen Literaturwerten zur besseren Übersicht nochmals getrennt gegenübergestellt.

In Bezug auf die Korrespondenz des hier entwickelten analytischen Modells auf der Basis der übergangsspezifischen Theoriespektren bei der Interbandanregung kann bereits hier gesagt werden, daß sich ein brauchbares Instrument ergeben hat, denn die Überlagerung der einzelnen Spektralanteile liefert eine befriedigende, d.h. innerhalb der zu erwartenden Fehlergrenzen liegende Gesamtdarstellung des Spektrums des Imaginärteils der Optischen Funktion von Germanium in dem hier relevanten Spektralbereich, der zur Berechnung des Realteils der DK (s. weiter unten) auf den Bereich von 0,5 eV bis 20 eV erweitert wurde.

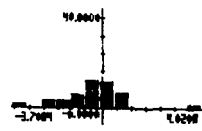
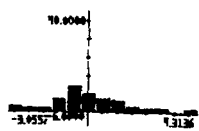
III.3 Silizium

Das Anpassungsergebnis (Anpassungsmodell „X3“) für den Betrag des Imaginärteils der relativen DK von reinem Silizium, dessen experimentelle Daten ebenfalls der Literaturstelle [11] für $x = 1$ entnommen wurden, zeigt Abb. 10 in gemeinsamer Auftragung. Die spektrale Abhängigkeit der Differenz zwischen Experiment und Modell



Diff. (Exp. - Modell)

Diff. (Exp. - Modell)



a)

b)

◀ Abb. 9:

Spektralverlauf von $-Im(DK_{rel})$ nach den Berechnungen mit Modell X3 für Photonenenergien von 1,7 eV bis 5,6 eV im Abstand von 0,1 eV.

Aufgetragen sind (von oben nach unten): das Spektrum, die sieben spektralen Anteile für die sieben Interbandübergänge IN, A, B, ... F (im Maximum jeweils auf Eins normiert), die Differenz zwischen den Meßwerten nach [11] und den berechneten Werten und das Histogramm der Differenzen:

a) für Germanium [die im spektralen Intervall 1,7 eV $h\nu$ 5,6 eV auftretenden Maximalwerte der spektralen Anteile an $-Im(DK_{rel})$ haben dabei für die einzelnen Übergänge (von oben nach unten) folgende Werte: IN: 0,0471, A: 1,1270, B: 4,6010, C: 20,5900, D: 19,2112, E: 11,6870 und F: 3,8473]

b) für Silizium [die entsprechenden, d. h. im spektralen Intervall 1,7 eV $h\nu$ 5,6 eV auftretenden Maximalwerte lauten: IN: 0,0263, A: 0,0642, B: 4,7305, C: 25,4524, D: 13,4994, E: 35,9780 und F: 9,4818]

zeigt Abb. 9b. Der Mittelwert der Abweichungen beträgt in dem gegebenen spektralen Bereich von 1,7 bis 5,6 eV Photonenenergie bei 40 Stützstellen im Abstand von 0,1 eV $D(Exp-Mod) = -0,3787$ mit einer Standardabweichung von $SDEV(Exp-Mod) = 1,2232$. Die Abweichungen sind nach Ausweis des Histogramms (vergl. Abb. 9b) wiederum etwa Gauß-verteilt. – Eliminiert man auch hier den jeweils größten positiven und negativen Abweichungswert aus der Statistik (vgl. oben bei Ge), so ergibt sich der Wert $SDEV(Exp-Mod) = 0,8680$. Im Vergleich zum Ergebnis bei Germanium fällt die Anpassung noch etwas besser aus, was nicht zuletzt darin begründet ist, daß das Spektrum von $Im(DK)$ beim Si weniger stark spektral strukturiert und „kompakter“ ist.

Die Abb. 9b stellt als Übersicht die individuellen Beiträge der sieben Interbandübergänge zum Betrag des Imaginärteils der relativen DK dar. Die zugehörigen Anpassungsparameter sind der Tab. 2 zu entnehmen. Die relevanten kritischen Bandabstände sind dabei bis auf zwei in guter bzw. akzeptabler Übereinstimmung mit den in der Literatur genannten Werten (vergl. Tab. 1). Die kritischen Energiewerte für Silizium (und Germanium), wie sie sich aus der Anpassung ergeben, sind in Tab. 3 den in Tab. 1 aufgeführten Literaturwerten nochmals getrennt gegenübergestellt.

Die beiden größeren Abweichungen bei den kritischen Energiewerten beim Si beziehen sich auf den M_0 -Übergang „A“, der um 1,08 eV erniedrigt erscheint, und auf den Schwellenergiewert für den $e1$ -Übergang („B“), der sich im Rahmen der Anpassung um 0,48 eV erhöht ergibt. Diese beiden „Verlagerungen“ gegenüber den bisher in der Literatur für Si diskutierten Schwellenergien entsprechen aber der notwendigen spektralen Anpassung auf der Basis der Zahl der gegebenen Interbandübergänge und korrespondieren dabei in offensichtlicher Weise mit der experimentell gegebenen Spektralstruktur zwischen dem M_1 -Übergang E_1 („C“) und dem $M_{1,2}$ -Übergang „E“, die bis zu etwa $x = 0,5$ zwischen den beiden genannten Maxima relativ monoton, d. h. wenig moduliert verläuft (vergl. weiter unten die Diskussion der Mischkristallreihe).

Es sei darauf hingewiesen, daß das bei Variation der Mischkristallzusammensetzung nach [11] bei $x = 0,623$ auftretende „level crossing“ zwischen den kritischen Energien

des Übergangs „A“ und des Überganges „C“ hier nicht mehr relevant ist, wenn das „A“-Niveau beim Si, d. h. bei $x = 1$, wie oben angegeben, abgesenkt ist.

Da im Fall des reinen Siliziums die Anpassung sogar eine etwas kleinere Standardabweichung besitzt, als im Fall des reinen Germaniums, so kann die Leistungsfähigkeit des Modells auch hier nochmals recht positiv eingeschätzt werden. – Auf einen quantitativen Vergleich von experimentellen Im(DK)-Spektren von Si verschiedener Autoren untereinander wurde hier verzichtet, er liefert, ähnlich wie beim Ge (siehe oben), erheblich größere Abweichungen.

In	A	B	C	D	E	F
EKI = 0,66	EKA = 0,8	EKB = 3,7	EKC = 2,25	EKD = 3,2	EKE = 4,25	EKF = 5,45
EKCI = 0,44	EKCA = 2,2	EKCB = -1,1	EKCC = 1,1	EKCD = 0,3	EKVE = 0	EKCF = -0,2
		EKTB = 0,3		EKTD = 0,2		
AI = 0,8	AA = 2,52	AB = 10,0	AC = 21,8	AD = 34,54	AE = 21,0	AF = 11,0
ACI = -0,5	ACA = -2,4	ACB = -1,0	ACC = -5,0	ACD = 6,82	ACE = 1,8	ACF = 16,1
			AQC = 22,8		AQE = 63,6	
BI = 0,5	BFA = 2,0	BFB = 0,8	BNC = 0,25	BFD = 1,1	BNE = 2,1	BFF = 0,1
BCI = 0	BFCA = -1,0	BFCB = -0,4	BNCC = -0,2	BFCD = -0,7	BNCE = 0	BFCF = 0
TI = 1,0	TFA = 0,3	TFB = 0,3	TNC = 0,04	TFD = 0,5	TNE = 0,4	TFF = 0,2
TCI = -0,5	TFCA = 0	TFCB = -0,25	TNCC = 0,01	TFCD = -0,2	TNCE = 0,15	TFCF = 0
	RA = 0,05	RB = 0,05	RC = 0,02	RD = 0,2	VNE = 0,4	RF = 0,33
	RCA = 0	RCB = 0,05	RCC = 0,18	RCD = -0,13	VNCE = 0	RCF = 0
			BHC = 0,55		BHE = 2,0	
			BHCC = -0,3		BHCE = 0,15	
			THC = 0,14		THE = 0,2	
			THCC = 0		THCE = 0,3	
					VHE = 0,3	
					VHCE = 0	

Tabelle 2:

Zusammenstellung der Individualparameter im Anpassungsmodell „X3“ für die $\text{Ge}(1-x)\text{Si}(x)$ -Mischkristallreihe mit $0 \leq x \leq 1$. – Die Buchstabenkombinationen zur Kennzeichnung der Parameter ergeben sich aus den verwendeten Spektralfunktionen für die einzelnen Interbandübergänge, die durch die Buchstaben IN, A, B, ... gekennzeichnet sind (siehe Text). Zur Erleichterung der Schreibweise wurde „E₀“ durch „EK“ ersetzt.

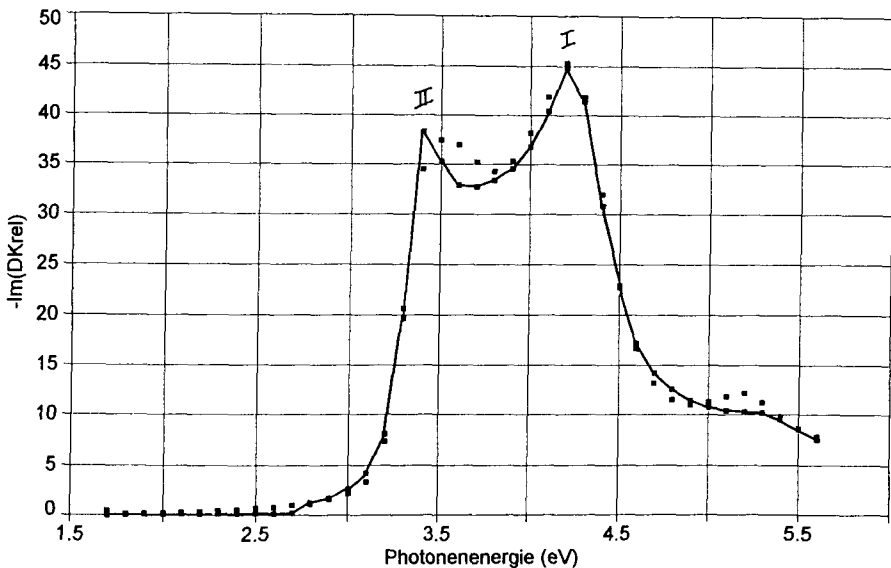


Abb. 10:

Spektralverlauf von $-Im(DK_{rel})$ von Silizium

- a) Messungen nach J. Humlíček et al. [11] (Meßpunkte verbunden) und
b) nach Modellberechnung mit dem Parametersatz „X3“

Übergang	GE Literaturwert	GE aus Anpassung	Si Literaturwert	Si aus Anpassung
In	0,65	0,66	1,1	1,1
A	0,8	0,8	4,08	3,0
B	1,95	2,6	3,18	3,66
C	2,18	2,25	3,4	3,35
D	3,22	3,2	3,5	3,5
E	4,42	4,25	4,37	4,25
F	5,9	5,45	5,5	5,25

Tabelle 3:

Gegenüberstellung der kritischen Energiewerte für die sieben Interbandübergänge. Die entsprechenden Photonenergien sind in [eV] angegeben. Für Ge und Si sind jeweils die Literaturwerte nach Tabelle 1 (falls dort mehrere Werte auftreten, dann der Mittelwert daraus) und die Werte gegenübergestellt, wie sie sich aus der Anpassung im Rahmen des „Modells X3“ ergeben haben. – Zur Erläuterung siehe Text.

III.4 Ge-Si-Mischkristallreihe

Für die Variation der „Linienparameter“ als Funktion des Zusammensetzungsparameters x wurde zunächst, dies in Analogie zu der Situation der praktisch linearen Verschiebung der Schwellenergien mit x „längs“ der Mischkristallreihe nach [11], auch für die übrigen Individualparameter (z. B. „T“) innerhalb des Modells ein linearer Ansatz vorgesehen:

$$TX(x) = T(\text{Ge}) + TC \cdot x; \quad TC = \text{const} \quad (\text{Gl. 14})$$

$$\text{mit } T(\text{Si}) = T(\text{Ge}) + TC.$$

Bei solch ausschließlich linearer Variation der Modellparameter als Funktion des Zusammensetzungsparameters x lassen sich die Spektren der Mischkristallreihe $\text{Ge}(1-x)\text{Si}(x)$ zwischen Ge und Si, also mit $0 < x < 1$, jedoch nicht mit Hilfe der für Ge und Si gefundenen Modellparameter mit hinreichender Genauigkeit in Übereinstimmung mit dem von [11] ermittelten experimentellen Befund darstellen. Es muß vielmehr bei mehreren Parametern eine nichtlineare Variation $f(x)$ berücksichtigt werden.

Als nichtlineare Funktionen mit nur einem weiteren Parameter wurden zwei Varianten verwendet (im Beispiel für den Linienparameter „A“):

1.) die quadratische Form

$$AX(x) = A(\text{Ge}) + AC \cdot x + AQ \cdot x^2 \quad (\text{Gl. 15a})$$

$$\text{mit } A(\text{Si}) = A(\text{Ge}) + AC + AQ$$

2.) die exponentielle Form

$$AX(x) = A + AC \cdot \exp[x/AT] \quad (\text{Gl. 15b})$$

bzw.

$$AX(x) = A(\text{Ge}) + AC \cdot \exp[(x-1)/AT] \quad (\text{Gl. 15c})$$

$$\text{mit } A(\text{Si}) = A(\text{Ge}) + AC$$

Die exponentielle Form, nach Bedarf mit positivem oder negativen Vorzeichen von AC , ist dabei u. U. vorteilhafter, da mit ihr auch eine Nichtlinearität gut dargestellt werden kann, die sich wesentlich nur bei kleinen bzw. großen x -Werten bemerkbar macht.

Die getrennte Bestimmung des dritten Nichtlinearitätsparameters gelingt durch eine zusätzliche Anpassung des Modells an ein experimentelles Spektrum mit $0 < x < 1$ oder durch eine „mittlere Anpassung“ unter Minimierung der Summe der Abweichungsquadrate für mehrere Spektren mit $0 < x < 1$.

Bei vier Linienparametern trat eine signifikant nichtlineare Funktion $f(x)$ auf:

1.) Es zeigt sich, daß zwar die spektrale Position der beiden prominenten Maxima „I“ und „II“ (vergl. Abb. 8, 9 und 10), die im wesentlichen dem E_2 -Übergang („E“) und dem E_1 -Übergang („C“) zuzurechnen sind, bei linearen Parameterfunktionen $f(x)$ gut wieder gegeben wird, nicht jedoch deren quantitative Größe. Dazu ist zunächst festzustellen, daß bei beiden Maxima eine ausgeprägt nichtlineare Variation ihrer Höhe vor-

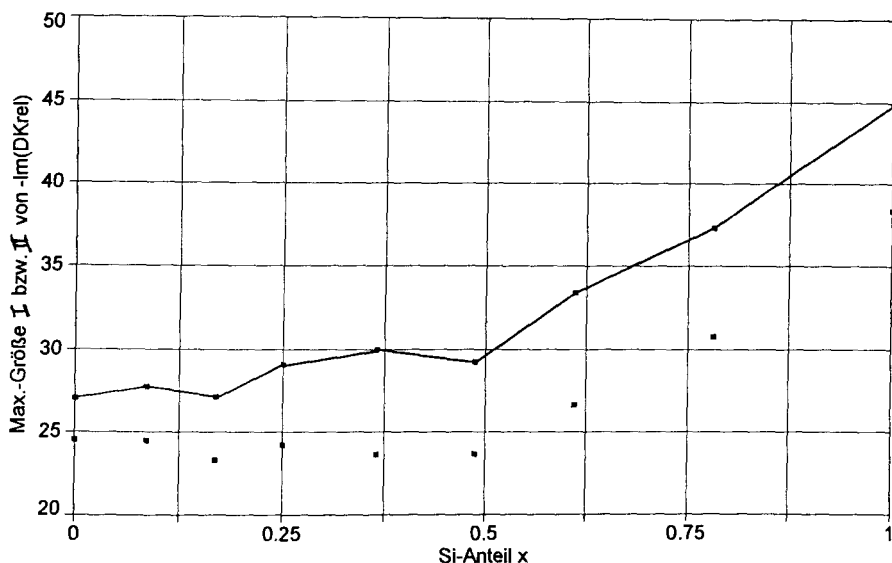


Abb. 11:

Höhe der beiden prominenten Maxima im $-Im(DKrel)$ -Spektrum von 1,7 eV bis 5,6 eV Photonenenergie nach Messungen von J. Humlíček et al. [11] als Funktion des Zusammensetzungsparameters x in der $Ge(1-x)Si(x)$ Mischkristallreihe:

- I) Maximum mit überwiegender Zuordnung zum Übergang „E“ (Meßpunkte verbunden) und II) Maximum mit überwiegender Zuordnung zum Übergang „C“ – vgl. dazu die Spektraldarstellungen z. B. in Abb. 8,9 und 10

liegt, die nach den Daten aus [11] in Abb. 11 in ihrem experimentellen Verlauf dargestellt ist.

Eine nichtlineare Variation der Größe des Betrages des Imaginärteils der DK in den genannten Maxima ist zwar auch bei linearer Variation der Individualparameter der sich überlagernden Spektralanteile gegeben, da sich die Spektralanteile einerseits selbst nichtlinear „verformen“ und andererseits so verlagern, daß sie sich „übereinanderschieben“.

Die sich durch dieses „Verformen“ und „Übereinanderschieben“ auch innerhalb des Modells bei linearer Parametervariation ergebende Nichtlinearität in der Höhe der beiden spektralen Maxima ist jedoch noch nicht ausreichend, den experimentellen Befund wiederzugeben. Es wurde deshalb bei den Übergängen „C“ und „E“ eine quadratische Variation des Proportionalitätsfaktor in der obigen Form Gl. 15a) eingeführt.

2.) Die beiden anderen nichtlinearen Fälle beziehen sich auf die kritische Übergangsenergie und eine dabei auftretende exponentiell-nichtlineare Variation $f(x)$. Es handelt sich um den Übergang „B“ mit der Abhängigkeit nach Gl. 15b) mit negativem EKC und um den Übergang „D“ mit der Funktion nach Gl. 15c) mit positivem EKC.

Mit diesen insgesamt vier „nichtlinearen Ergänzungen“ im Modell konnte die Anpassung für die gesamte Mischkristallreihe, d. h. für $0 \leq x \leq 1$, also unter Einschluß der reinen Materialien Ge mit $x = 0$ und Si mit $x = 1$, in befriedigender Weise realisiert werden. Die Tabelle 2 gibt die für das hier optimale Modell „X3“ gewonnenen Größen sämtlicher Individualparameter für die sieben sich überlagernden Spektralanteile an. Das Modell wurde empirisch so optimiert, daß die mittlere Standardabweichung aller Spektren minimiert ist. Die Tabelle 4 gibt eine Übersicht über die im Vergleich zu den experimentellen Spektren nach [11] erreichte Genauigkeit der Modelldarstellung der neun verfügbaren Spektren. Die Mittelwerte bei den neun Spektren, basierend auf je 40 spektralen Stützpunkten im Abstand von 0,1 eV im spektralen Intervall $1,7 \text{ eV} \leq E \leq 5,6 \text{ eV}$, lauten:

mittlere Abweichung = 0,5055, mittlere Standardabweichung = 1,4605.

Die Genauigkeit ließe sich wohl noch steigern, wenn statt der Anpassung „nach Augenmaß“ eine computergestützte Optimierung der Parameterbestimmung durchgeführt wird. Die dazu erforderlichen Computerprogramme sind verfügbar (vergl. dazu die „Rezepte“ in [18]). Eine dramatische Verbesserung ist dabei jedoch nicht zu erwarten, denn die experimentellen Spektren sind ihrerseits nicht ohne statistische Fehler, worauf die Autoren von [11] ausdrücklich hinweisen und was sie veranlaßte, ihre Kurven bzw. Meßwertsätze nicht einer Glättungsprozedur („smoothing“) zu unterwerfen.

Die Abb. 12 und 13 zeigen als Übersicht jeweils den Spektrensatz nach Experiment bzw. nach Modellberechnung. Damit soll die Einschätzung augenfälliger werden, daß die Modelldarstellung die Variation der Spektren innerhalb der Mischkristallreihe in äquivalenter Weise reproduziert.

	x	MEAN	SDEV
GE	0	-0,1872	0,8602
	0,086	0,2835	0,9730
	0,169	0,0878	1,0469
	0,250	0,7772	1,4490
	0,365	0,8626	1,8273
	0,487	0,5205	1,5633
	0,611	0,7828	2,0379
	0,782	0,5474	2,2758
Si	1	-0,3212	1,0407
Mittel:		0,3726	1,4538

Tab. 4 :

Genauigkeitsangaben zur Anpassung der $\epsilon''(E)$ -Spektren des Modells „X3“ an die experimentellen Spektren in der Reihe der $\text{Ge}(1-x)\text{Si}(x)$ Mischkristalle nach J. Humlíček et al. [11]. Aufgeführt sind a) die mittlere Differenz $D(\text{Exp-Mod})$ („MEAN“) und b) die Standardabweichung $SDEV(\text{Exp-Mod})$ („SDEV“) für 40 spektrale Punkte im Abstand von 0,1 eV im Intervall der Photonenenergie E : $1,7 \text{ eV} \leq E \leq 5,6 \text{ eV}$. –

Zu weiteren Angaben vgl. Text.

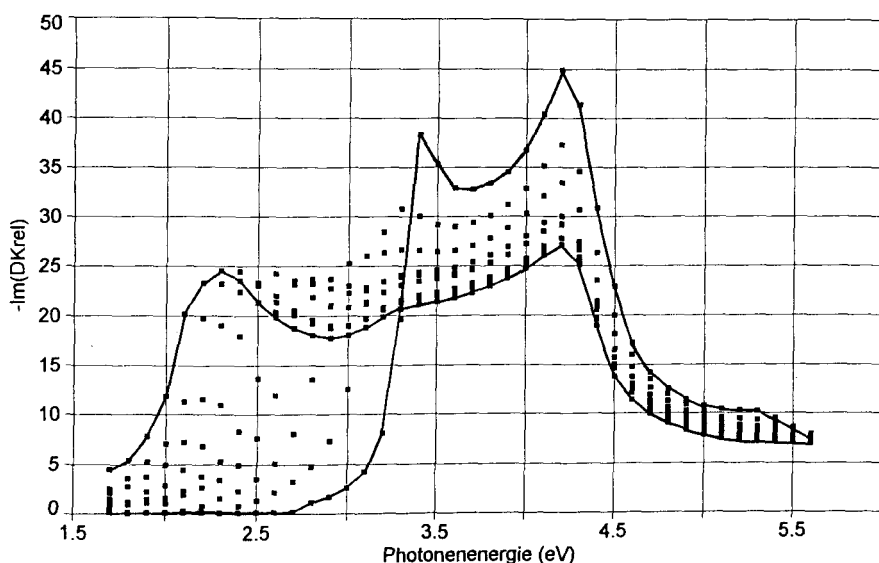


Abb. 12:

Gemeinsame Darstellung der 9 experimentell ermittelten Spektren von $-\text{Im}(\text{DKrel})$ im Bereich zwischen 1,7 eV und 5,6 eV Photonenenergie für die neun verschiedenen x -Werte innerhalb der $\text{Ge}(1-x)\text{Si}(x)$ Mischkristallreihe nach J. Humlíček et al. [11].

Der x -Wert variiert etwa gleichabständig zwischen $x = 0$ (für Ge) und $x = 1$ (für Si) [für die genauen x -Werte siehe Tab. 4].

IV Realteil der DK bei Interbandübergängen

IV.1 Kramers-Kronig-Relation

Bei „optisch linearer“ Materie stehen Real- und Imaginärteil der Dielektrizitätskonstanten (DK) auf der Basis einer Integralbeziehung in einem festen Zusammenhang. Diese Integralbeziehung ist die Kramers-Kronig-Relation (KKR) [19]. Der hier zur Anwendung kommende Teil der KKR zur Berechnung des Realteils der DK aus dem Imaginärteil wurde oben bereits angegeben (s. Gl. 2).

Aufgrund der festen Transformationsbeziehung zwischen Real- und Imaginärteil der DK wäre ein Vergleich der Realteilspektren von Experiment und Modell eigentlich überflüssig. Er findet hier jedoch wenigstens in drei Beispielen statt, um die Genauigkeit der Modelldarstellung aus anderer Sicht zu beleuchten, denn die nichtlineare KKR führt zu einer etwas anderen Gewichtung von Abweichungen. Andererseits bleibt der Vergleich im konkreten Fall jedoch problematisch, da die Frage offen ist, ob die von [11] mitgeteilten experimentellen Spektren von ϵ' und ϵ'' durch eine KKR auf ihre innere Konsistenz hin überprüft worden sind. Es handelt sich zunächst in allen Fällen um die an isolierten Spektralpunkten gewonnenen Meßwerte von ϵ' und ϵ'' . – Bei der Bewertung des konkreten Vergleichsergebnisses hier muß dies berücksichtigt werden.

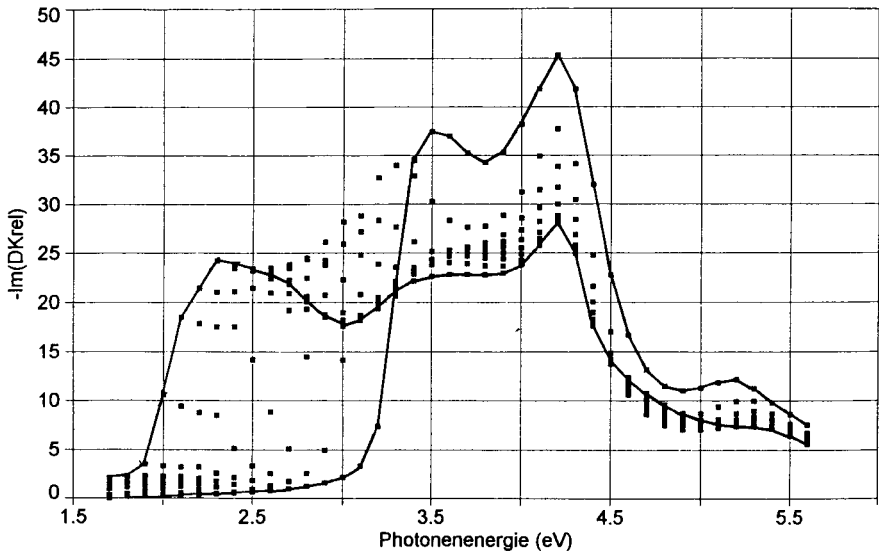


Abb. 13:

Gemeinsame Darstellung der 9 durch Modellrechnung (Parametersatz „X3“) gewonnenen Spektren von $-\text{Im}(\text{DKrel})$ im Bereich zwischen 1,7 eV und 5,6 eV Photonenenergie für die gleichen neun verschiedenen x -Werte innerhalb der $\text{Ge}(1-x)\text{Si}(x)$ Mischkristallreihe, für die in Abb. 12 experimentelle Spektren dargestellt sind.

Der x -Wert variiert etwa gleichabständig zwischen $x = 0$ (für Ge) und $x = 1$ (für Si) [für die genauen x -Werte siehe Tab. 4].

Die Anwendung der KKR stößt formal auf die Schwierigkeit, daß die Spektralfunktion des Imaginärteils nicht in der vollen Ausdehnung, d. h. von der Frequenz, bzw. der Photonenenergie, Null bis Unendlich, bekannt ist. Es genügt aber i. allg. für die numerisch nicht verfügbaren „Randbereiche“ Näherungsfunktionen anzunehmen, denn aufgrund der im Integranden der KKR enthaltenen „Bewertungsfunktion“ für den Imaginärteil einerseits und der für hinreichend große Photonenenergien zu Null abnehmenden dielektrischen Absorption der Materie andererseits, kann der hochenergetische Ausläufer i. allg. gut durch eine abfallende Potenzfunktion approximiert werden. – Grundsätzlich muß der Realteil der relativen DK mit wachsender Frequenz, bzw. Photonenenergie E_1 , stets den asymptotischen Wert Eins erreichen.

Bei der Berechnung der Spektralfunktion des Realteils der DK in definierten Grenzen E_I bis E_{II} kann der integrale Anteil von E_{III} bis Unendlich immer dann durch eine additive Konstante ersetzt werden, wenn E_{III} hinreichend oberhalb von E_{II} gewählt wird.

In diesem Sinne wird im vorliegenden Fall der Realteil der DK für den Bereich der Interbandübergänge der Ge-Si-Mischkristallreihe von $E_I = 0,5$ eV bis $E_{II} = 5,6$ eV berechnet und dabei ein Modellspektrum des Imaginärteils von 0,5 eV bis $E_{III} = 20$ eV

zugrunde gelegt. Es wird zu diskutieren sein, wie groß die additive Konstante ist, die benötigt wird, um den Realteil der DK bei E_I auf den experimentellen Wert zu bringen.

Interbandübergänge aus dem d-Band der Mischkristalle, die das Modell nicht enthält, sind dabei mit ihren dielektrischen Suszeptilitätsbeiträgen in diesem additiven Beitrag des „hochenergetischen Anteils“ zum Realteil der DK enthalten. Für Germanium beträgt dieser Anteil etwa 0,5 (nach [5a] und [10]) und ist bei Silizium Null, da dort kein d-Band existiert.

Der andere dielektrische Beitrag aus dem höherenergetischen Bereich oberhalb von ca. 12 eV wird von den vier Valenzelektronen der Ge- bzw. Si-Atome geliefert, die unter der Photonenanregung derart hoher Quantenenergie bereits als „freie Elektronen“ zu betrachten sind. Diese Suszeptilitätsbeiträge sind speziell für Ge, Si und III-V-Verbindungshalbleiter bereits 1962 und 1963 von H. R. Philipp und H. Ehrenreich [10] ausführlich unter Bezug auf entsprechende Messungen bis Photonenenergien von ca. 28 eV diskutiert worden, wobei die d-Band-Effekte und die verbundenen Plasmaeffekte separiert sind.

Die Absorptionsmechanismen unterhalb von 0,5 eV Photonenenergie, das sind Phononen-, Störstellen- und Freie-Ladungsträger-Anregungen innerhalb eines Bandes, liefern im vorliegenden Fall keinen nennenswerten Beitrag mehr zum Realteil der DK im Bereich E_I bis E_{II} , da E_I bereits hinreichend oberhalb der jeweiligen spezifischen Anregungsenergien bzw. der Relaxationsenergie $h/\text{Stoßzeit}$ der freien Ladungsträger liegt.

IV.2 Auswertung des Anpassungsmodells

Die Spektren des $\text{Im}(\text{DK}_{\text{rel}})$ wurden für das Modell „X3“ bei den hier diskutierten Werten des Zusammensetzungsparameters x (vergl. Tab. 4) für die Mischkristallreihe $\text{Ge}(1-x)\text{Si}(x)$ im Spektralbereich von 0,5 eV bis 20 eV berechnet und der Kramers-Kronig-Transformation (KKT) über dem gleichen spektralen Intervall unterworfen. Da der Imaginärteil der DK, soweit er durch die hier behandelten 7 Interbandübergänge der Fundamentalabsorption bedingt ist, zu den Rändern dieses spektralen Intervalls hin praktisch bereits auf Null abgeklungen ist, ist es auch ausreichend, die Integrationsgrenzen bei der KKT ebenfalls auf diesen Bereich von 0,5 eV bis 20 eV zu beschränken.

Das Ergebnis, d. h. die sich ergebende Spektralfunktion des $\text{Re}(\text{DK}_{\text{rel}}, E)$ mit $0,5 \text{ eV} \leq E \leq 20 \text{ eV}$, ist mit den bekannten Daten für Ge und Si und hier insbesondere mit den experimentellen Werten von [11] für die Mischkristallreihe, die allerdings nur für das Intervall von 1,7 eV bis 5,6 eV vorliegen, zu vergleichen.

Dieser Vergleich soll hier nur für die drei Fälle: Ge, Si und den Mischkristall $\text{Ge}(1-0,487)\text{Si}(0,487)$ ausführlicher und damit beispielhaft vorgestellt und diskutiert werden. Die Ergebnisse für die anderen x -Werte fallen entsprechend aus, da die Übereinstimmung zwischen Modell und Experiment in den Imaginärteilspektren analog ist (siehe oben).

a) Germanium

Abb. 14 zeigt zunächst das sich ergebene Spektrum von $\text{Re}(\text{DKrel})$ für Germanium, das in dieser „puren“ Form und Quantität alleine durch die Modelldarstellung auf der Basis der sieben diskutierten Interbandübergänge bestimmt ist. Da höherenergetische Anregungsprozesse noch nicht berücksichtigt sind, liegen die dargestellten Werte des Realteils noch geringfügig unterhalb der „wahren“ Größe.

Zur Diskussion ist folgendes auszuführen:

- 1.) Im Vergleich mit dem experimentellen Befund (vgl. z. B. [10]) wird die generelle spektrale Struktur von $\epsilon'(E)$ sehr gut wiedergegeben.
- 2.) Bei 20 eV ist mit $\epsilon'(20 \text{ eV}) = 0,5768$ der asymptotisch zu erwartende theoretische Wert Eins schon akzeptabel gut erreicht.
- 3.) Bei 0,5 eV variiert $\epsilon'(E)$ nur noch sehr schwach, so daß die optische Dispersion in Übereinstimmung mit dem Experiment unterhalb der Absorptionskante richtig auf Null abklingt.
- 4.) Bei 0,5 eV ist $\epsilon'(0,5 \text{ eV; Modell X3 pur}) = 15,5581$. Bevor dieser Wert mit dem experimentellen Befund verglichen werden kann, muß der dielektrische Einfluß der höherenergetischen Anregungen, infolge z. B. der bei Ge gegebenen d-Band-Effekte und aufgrund der Polarisation der bei höheren Photonenenergien als „frei“ zu betrachtenden Valenzelektronen, durch Addition eines entsprechenden Suszeptibilitätsbeitra-

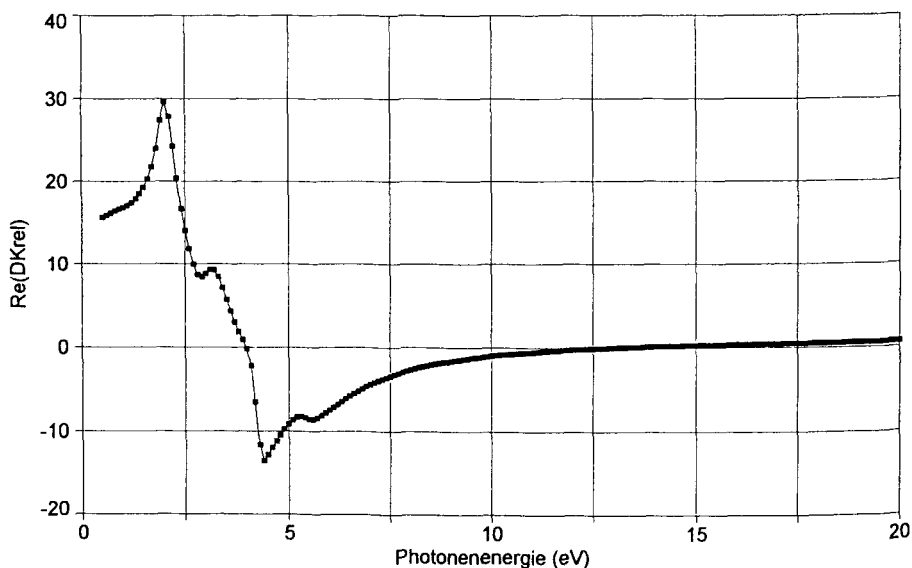


Abb. 14:

Spektralverlauf des $\text{Re}(\text{DKrel})$ von Germanium, wie er sich aus der Modellberechnung für den Imaginärteil (Parametersatz „X3“) mit nachfolgender Kramers-Kronig-Transformation ergibt. In dieser „puren“ Form enthält das Spektrum nur die Suszeptibilitätsanteile der im Modell erfaßten Interbandanregungen.

ges berücksichtigt werden. Nach Literaturangaben (vergl. z. B. [5a] und [10]) ist für diesen Beitrag $\Delta\epsilon'$ ein Wert von 0,5 anzusetzen. Der sich damit insgesamt ergebende Wert für $\epsilon'(0,5 \text{ eV, Modell}) = 16,0581$ stimmt in ausgezeichneter Weise mit dem sich aus der reellen Brechzahl von Germanium $n(0,5 \text{ eV, Exp.}) = 4,0676$ (nach [20], mittels Prismenmethode gemessen) ergebenden Wert überein, denn infolge der Absorptionsfreiheit bei 0,5 eV Photonenenergie liefert das Modell bei additiver Berücksichtigung der höherenergetischen Einflüsse den Wert $n(0,5 \text{ eV, Modell}) = \sqrt{[\epsilon'(0,5 \text{ eV, Modell})]} = 4,0073$, ein Wert, der nur 0,015 % unterhalb des experimentellen Wertes liegt.

- 5.) Fügt man in dem Spektralbereich von 1,7 eV bis 5,6 eV den in Abb. 14 dargestellten Werten von $\epsilon'(E, \text{Modell X3 pur})$ die unter 3.) angegebene additive Suszeptibilitätskonstante zur Berücksichtigung der Existenz der höherenergetischen dielektrischen Einflüsse hinzu, so erhält man, wie in Abb. 15 vergleichend dargestellt, eine befriedigende Übereinstimmung mit dem ϵ' -Spektrum aus experimenteller Messung nach [11], das sich auf die gleiche Probe bezieht, deren experimentelles $\text{Im}(\text{DKrel})$ -Spektrum zur Modellanpassung verwendet wurde. – Es sei zu der Addition einer spektral konstanten(!) Größe zur Berücksichtigung der höherenergetischen Einflüsse in diesem Spektralbereich bemerkt, daß dies insofern erlaubt ist, als die der höherenerge-

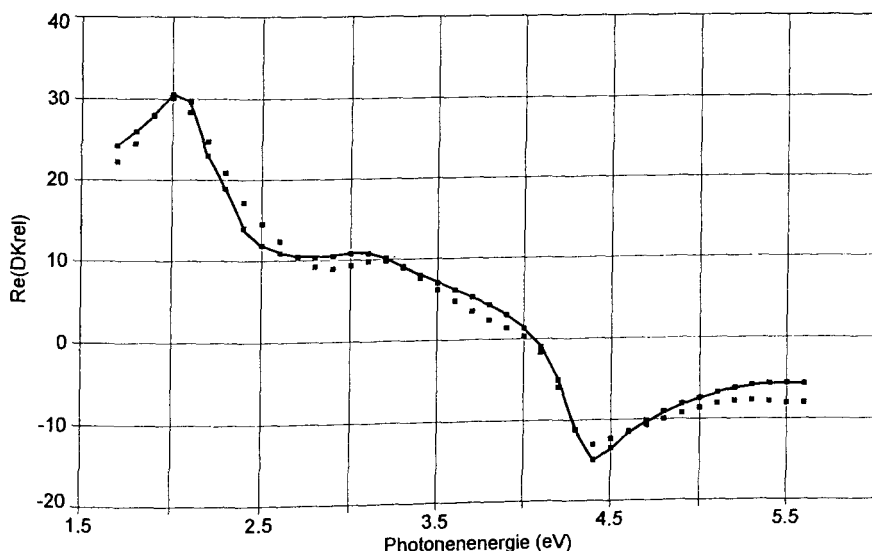


Abb. 15:

Vergleichende Darstellung des $\text{Re}(\text{DKrel})$ von Germanium im Spektralbereich zwischen 1,7 eV und 5,6 eV Photonenenergie:

- a) Meßwerte nach J. Humlíček et al. [11] (verbundene Punkte)
- b) berechnete Werte nach Modell „X3“ (vgl. Abb. 14) jedoch mit Addition eines geringen, reellen und spektral konstanten Suszeptibilitätsbeitrages zur Berücksichtigung höherenergetischer Anregungsprozesse (s. Text)

tischen Anregung zuzuordnende Absorption erst oberhalb von ca. 12 eV einsetzt (vergl. [10]) und damit unterhalb von 5,6 eV Photonenenergie nurmehr ohne spektrale Abhängigkeit zum Realteil der dielektrischen Polarisierung beiträgt.

- 6.) Aus Abb. 15 ist zu erkennen, daß in diesem Spektralbereich von 1,7 eV bis 5,6 eV das Modellspektrum in systematisch quantitativer Abweichung noch geringfügig unterhalb des experimentellen Spektrums liegt. Eine gewisse Anhebung des Modellspektrums würde sich hier im konkreten Fall noch ergeben, wenn man bei der Modellanpassung in einer „letzten Korrektur“ der Amplitudenfaktoren der spektralen Anteile im $\text{Im}(\text{DKrel})$ -Spektrum dafür sorgen würde, daß die mittlere Abweichung $D(\text{Exp-Mod}) = 0$ ist (vergl. dazu Tab. 4). Im vorliegenden Fall, d. h. mit dem vorliegenden Wert der mittleren Abweichung für Ge mit nur $D(\text{Exp-Mod}) = 0,0545$ würde diesbezüglich jedoch nur eine relativ kleine Verbesserung erreicht.
- 7.) Zusammenfassend kann festgestellt werden, daß beim Ge das Modellergebnis auch in Bezug des Realteils der DK gut mit dem experimentellen Befund übereinstimmt, wenn sich, wie geschehen, die Modellanpassung auf das experimentelle Spektrum des Imaginärteils der DK des gleichen Materials bezieht.

b) Silizium

In Analogie zu Darstellung und Diskussion von Germanium zeigt Abb. 16 zunächst das sich aus dem Modell „X3“ ergebende „pure“ ϵ' -Spektrum von Silizium im Bereich von 0,5 eV bis 20 eV, wie es sich demnach nach Form und Quantität alleine auf der Basis der sieben diskutierten Interbandübergänge ergibt. Im einzelnen ist festzuhalten:

- 1.) Der Spektralverlauf entspricht der Struktur nach den bekannten experimentellen Ergebnissen.
- 2.) Bei 20 eV wird der Wert $\epsilon'(20 \text{ eV, Modell}) = 0,5212$ erreicht, der bereits hinreichend nahe beim erwarteten, d. h. theoretisch festliegenden asymptotischen Wert Eins liegt.
- 3.) Bei 0,5 eV ist die Funktion $\epsilon'(E)$ praktisch konstant und damit die optische Dispersion in Übereinstimmung mit dem experimentellen Befund nahezu Null.
- 4.) Bei 0,5 eV ist $\epsilon'(0,5 \text{ eV, Modell}) = 11,2483$, woraus sich infolge Absorptionsfreiheit bei dieser Photonenenergie eine reelle Brechzahl von $n(0,5 \text{ eV, Modell}) = \sqrt{\epsilon'(0,5 \text{ eV, Modell})} = 3,3538$ ergibt. Dieser Wert stimmt mit dem experimentellen Wert nach [20] (gemessen mit der Prismenmethode) $n(0,5 \text{ eV, Exp.}) = 3,44$ bis auf 2,6 % Abweichung überein. Dabei liegt der hier ermittelte Wert unter dem experimentellen Wert. – Die Frage muß hier offen bleiben, inwieweit ein Vergleich der Werte von ϵ' der bei [11] verwendeten dünnen Schichten, und darauf bezieht sich ja die Modellanpassung, mit den Werten, die an einkristallinen bulk-Proben gewonnen wurden, sinnvoll ist, wenn Strukturdetails und/oder Oberflächenzustände wahrscheinlich unterschiedlich sind.
- 5.) Die gute Übereinstimmung nach 4.) bestätigt, daß d-Band-Effekte und/oder andere höherenergetische Anregungseinflüsse beim Si nicht zu berücksichtigen sind. Diese Feststellung ist in Einklang mit der Diskussion und der quantitativen Aussage bei [10].

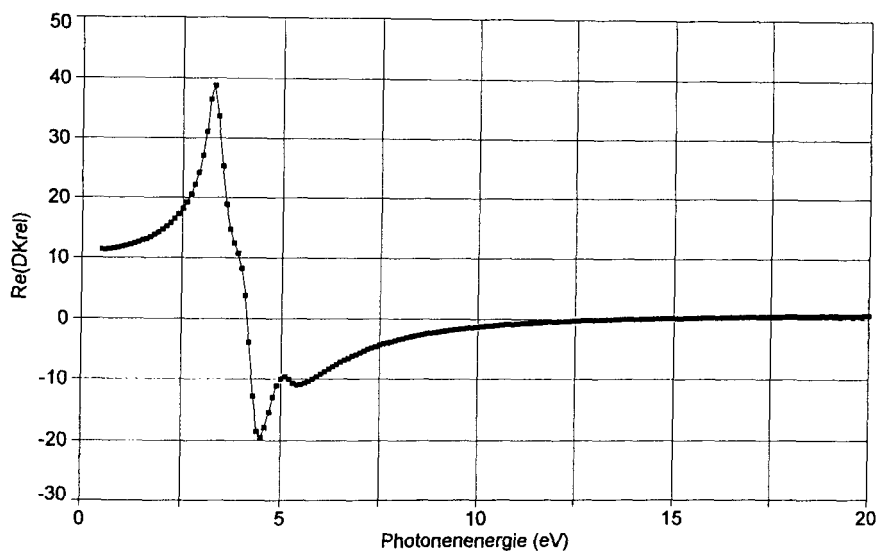


Abb. 16:

Spektralverlauf des $Re(DK_{rel})$ von Silizium, wie er sich aus der Modellberechnung für den Imaginärteil (Parametersatz „X3“) mit nachfolgender Kramers-Kronig-Transformation ergibt. In dieser „puren“ Form enthält das Spektrum nur die Suszeptibilitätsanteile der im Modell erfaßten Interbandanregungen.

- 6.) Abb. 17 zeigt für den spektralen Ausschnitt von 1,7 eV bis 5,6 eV das Modellresultat von $\epsilon'(E)$ mit dem experimentellen Resultat nach [11]. Die Übereinstimmung ist als Ganzes gesehen sehr befriedigend. Das Modellspektrum liegt nur geringfügig, wenn auch systematisch, etwas unterhalb des experimentellen Spektrums.
- 7.) Die gute Übereinstimmung zwischen Modell und Experiment im niederenergetischen Bereich von $Re(DK)$ verschlechtert sich nicht wesentlich, wenn man den Tatbestand korrigiert, daß der Parametersatz des X3-Modells beim $Im(DK)$ -Spektrum im Bereich 1,7 eV bis 5,6 eV eine mittlere Abweichung $D(Exp-Mod) = -0,3787$ (vgl. Tab. 4) liefert. Eine entsprechende Korrektur der Amplitudenfaktoren der spektralen Anteile im $Im(DK)$ -Modellspektrum hat hier jedoch vergleichsweise geringe Auswirkungen, denn der Integrand bei der KKT ist von relativ geringer spektraler Ausdehnung.
- 8.) Zusammenfassend kann festgestellt werden, daß auch beim Si das Modellergebnis in Bezug auf den Realteil der DK gut mit dem experimentellen Befund übereinstimmt, wenn sich, wie geschehen, die Modellanpassung auf das experimentelle Spektrum des Imaginärteils der DK des gleichen Materials bezieht.

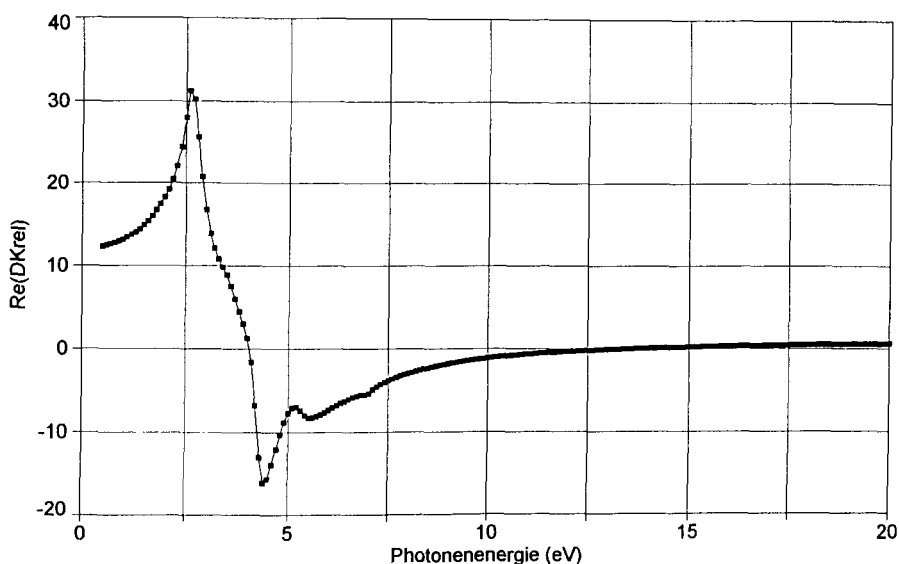


Abb. 18:

Spektralverlauf des $\text{Re}(\text{DKrel})$ für den $\text{Ge}(1-0,487)\text{Si}(0,487)$ -Mischkristall, wie er sich aus der Modellberechnung für den Imaginärteil (Parametersatz „X3“) mit nachfolgender Kramers-Kronig-Transformation ergibt. In dieser „reinen“ Form enthält das Spektrum nur die Suszeptibilitätsanteile der im Modell erfaßten Interbandanregungen. – Das Spektrum ist korrigiert bezüglich der verbliebenen Anpassungsdivergenz im $\text{Im}(\text{DKrel})$ -Spektrum – s. Text.

- 1.) Bei 20 eV ist mit dem Wert $\epsilon'(20 \text{ eV, Modell}) = 0,5608$ der theoretisch asymptotische Wert Eins für E gegen Unendlich bereits zu ca 56 % erreicht.
- 2.) Abb. 19 zeigt in Gegenüberstellung von Modell und Experiment den spektralen Verlauf von $\epsilon'(E)$ im Intervall von 1,7 eV bis 5,6 eV. Der allgemeine Verlauf stimmt befriedigend überein. Aus der Feststellung, daß das Modellspektrum jedoch in systematischer Weise etwas unterhalb des experimentellen Spektrums liegt und zwar mit einem mittleren Abstand von 0,9628, ist auf die Existenz höherenergetischer Anregungsprozesse zu schließen, die in Analogie zu reinem Ge auf d-Band-Effekte und/oder auf die Polarisation der bei den höheren Photonenenergien als „frei“ aufzufassenden Valenzelektronen zurückzuführen sind. Die Photonenenergien zu diesen Anregungen liegen i. allg. oberhalb von 12 eV. Da im vorliegenden Mischkristall ein Ge-Anteil von ca 50% besteht, ist ein dieszüglicher, spektral konstanter Suszeptibilitätsbeitrag zu erwarten. Der angegebene Wert dieses Suszeptibilitätsbeitrages, der natürlich nur als Abschätzung gelten kann, liegt jedenfalls in einer „vernünftigen“ Größenordnung.
- 3.) Das unter 1.) angegebene Spektrum liefert für die Photonenenergie 0,5 eV, bei der die Absorption nahezu Null ist, den Wert $\epsilon'(0,5 \text{ eV, Modell}) = 12,3066$. Dieser Wert

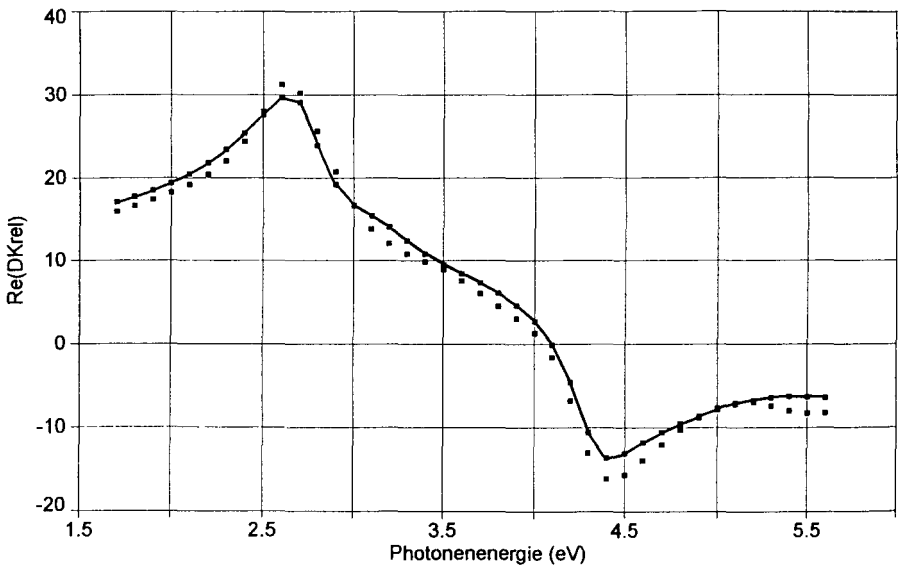


Abb. 19:

Vergleichende Darstellung von $Re(DK_{rel})$ für den $Ge(1-0,487)Si(0,487)$ -Mischkristall im Spektralbereich zwischen 1,7 eV und 5,6 eV Photonenenergie:

- a) Meßwerte nach J. Humlíček et al. [11] (verbundene Punkte)
 b) berechnete Werte nach Modell „X3“ (vgl. Abb. 18) unter Addition eines geringen, reellen und spektral konstanten Suszeptibilitätsbeitrages zur Berücksichtigung höher-energetischer Anregungsprozesse (s. Text)

ist ebenfalls um die unter 2.) diskutierte Konstante, d. h. um den Wert 0,9628 zu erhöhen. Damit ergibt sich bei 0,5 eV eine reelle Brechzahl $n(0,5 \text{ eV}, x = 0,487; \text{Modell}) = 3,6427$ für diese Substanz. Dieser Wert kann jedoch mangels entsprechender Angabe in [11] nicht mit einem experimentellen Meßwert an der gleichen Probe verglichen werden. Ein anderer experimenteller Vergleichswert für einen $Ge(1-x)Si(x)$ -Mischkristall mit $x = 0,487$ steht auch nicht aus der weiteren Literatur zur Verfügung. – Das Modellergebnis möge aber einmal mit dem sich aus der Theorie der Mischmedien nach Clausius-Mosotti (C.-M.) ergebenden Wert verglichen werden: Setzt man in diesem Sinne voraus, daß die „Teilchen“ unabhängig vom Zusammensetzungsparameter x ihre Polarisierbarkeit beibehalten, so gilt hier:

$$[(\epsilon' - 1)/(\epsilon' + 2)]_x = (1 - x) \cdot [(\epsilon' - 1)/(\epsilon' + 2)]_{Ge} + x \cdot [(\epsilon' - 1)/(\epsilon' + 2)]_{Si} \quad (\text{Gl. 16})$$

Danach ergibt sich mit den oben genannten experimentellen Brechzahlwerten von Ge und Si für den Ge-Si-Mischkristall mit $x = 0,487$ der Wert $n(x = 0,487, \text{C.-M.}) = 3,73$, der (nur) um 2,5 % von dem „Modellwert“ nach oben abweicht.

- 4.) Abschließend ist festzustellen, daß sich für den $Ge(1-x)Si(x)$ -Mischkristall mit $x = 0,487$ auf der Grundlage des hier vorgeschlagenen Modells und unter Berücksichti-

gung höherenergetischer Suszeptibilitätsbeiträge insgesamt eine gute Übereinstimmung zwischen der Modelldarstellung des Verlaufs des Realteils der DK und dem diesbezüglich experimentell ermittelten Spektrum ergibt. – Man kann diese Aussage auch für die Ge-Si-Mischkristalle mit anderem Wert des Zusammensetzungsparameters erwarten, da für diese die Modelldarstellung des Spektralverlaufs des Imaginärteils der DK mit analoger Genauigkeit gelungen war (s. oben) und damit für den Realteil der DK nach formaler Kramers-Kronig-Transformation korrespondierende Resultate zu erwarten sind.

Faßt man das Resultat für das Kapitel IV zusammen, so ist festzustellen, daß mit der relativ guten, d. h. innerhalb der erwarteten Fehlergrenzen liegenden Modelldarstellung des spektralen Verlaufs von Real- und Imaginärteil der DK die komplexe Optische Funktion in dem Gesamtbereich der Fundamentalabsorption für die $\text{Ge}(1-x)\text{Si}(x)$ -Mischkristallreihe in alleiniger Abhängigkeit vom Zusammensetzungsparameter x in geschlossener Form funktional in befriedigender Weise erfaßt wird.

V Zusammenfassung

Ziel der Arbeit ist die Modellierung der komplexen Optischen Funktion im Spektralbereich der Interbandübergänge der Halbleiter, speziell der $\text{Ge}(1-x)\text{Si}(x)$ -Mischkristalle. Dazu werden für die spezifischen spektralen Anteile, die mit den im k -Raum lokalisierten Interbandübergängen korrespondieren und dabei vom van-Hove-Typus des kritischen Punktes der kombinierten Zustandsdichte in diesem Bereich abhängen, spezielle Funktionen für den Spektralverlauf des Imaginärteils der komplexen Dielektrizitätskonstanten in dem relevanten Bereich der Photonen-Energien angegeben.

Diese speziellen Funktionen stützen sich auf die quantenmechanisch begründete dielektrische Funktion und entsprechen insbesondere in der energetischen Nähe der kritischen Energieschwelle den bekannten Theorie-Funktionen. Zusätzlich dazu sind über spezifische Spektralfaktoren einerseits das „Tailing“ der Bandausläufer und die energetische Breite der betreffenden Übergangsbereiche berücksichtigt.

Die Parameter der speziellen Funktion sind für jeden spektralen Anteil anzupassen. Ihr Wert steht damit in einem unmittelbarem Zusammenhang mit dem Bändermodell der betreffenden Substanz.

Die Spektralfunktion des Realteils der komplexen Dielektrizitätskonstanten für den Gesamtbereich der Fundamentalabsorption des Materials wird mit Hilfe der Kramers-Kronig-Relation ermittelt. Dazu umfaßt die Spektraldarstellung des Imaginärteils mit hinreichender Breite alle Anteile der optischen Interbandanregung einschließlich des indirekten Interbandüberganges, wenn dieser die langwellige Absorptionskante der Fundamentalabsorption bildet. – Zusätzlich werden gegebenenfalls höherenergetische Anregungsprozesse, z. B. d -Band-Effekte und die Anregung der als „frei“ aufzufassenden Valenzelektronen, durch Addition einer Suszeptibilitätskonstanten berücksichtigt, die sich wiederum aus einem quantitativen Vergleich mit der „langwelligen“ bzw. stati-

schen reellen DK oder aus der hinreichend langwelligen reellen optischen Brechzahl des Materials ergibt.

Die entwickelte Spektraldarstellung der komplexen Optischen Funktion unterscheidet sich von anderen Approximationen, die in der Literatur bisher diskutiert werden, grundsätzlich. Die Interpretation der durch Anpassung an den experimentellen Befund gefundenen Individualparameter vermittelt hier detaillierte Kenntnisse über das Bändermodell und die Anregungsprozesse der betreffenden Substanz.

Die Modelldarstellung wird in der vorliegenden Arbeit angewandt auf die Germanium-Silizium-Mischkristallreihe unter Variation des Zusammensetzungsparameters x unter Einschluß der reinen Komponenten Germanium und Silizium. Die Analyse des gleitenden Überganges der Optischen Funktion von der des Germaniums in die des Siliziums, womit „dramatische“ Veränderungen nach Qualität und Quantität der Spektren von Real- und Imaginärteil verbunden sind, ist nicht nur von wissenschaftlichem Interesse, sondern auch hilfreich im technologischen Anwendungsbereich dieser Materialien, der gerade derzeit in Ausdehnung begriffen ist.

Die „geschlossene“ Darstellung der Optischen Funktion innerhalb der Mischkristallreihe bei variierendem Zusammensetzungsparameter x beginnt mit der Anpassung der Individualparameter an das vorliegende experimentelle Spektrum von $\text{Im}(\text{DK})$ von Ge, dem die Anpassung an das experimentelle Spektrum von $\text{Im}(\text{DK})$ von Si unter Einführung des Parameters x mit dem Wert $x = 1$ folgt. Alle Individualparameter der spektralen Anteile der optischen Absorption infolge der Interbandanregung werden dabei als eindeutige Funktion von x angesetzt. Diese Abhängigkeit vom Zusammensetzungsparameter ist in der Regel mit hinreichender Genauigkeit als linear anzusetzen, in einigen Fällen jedoch eindeutig als nichtlineare Funktion identifiziert worden.

Die Basis der Parameteranpassung ist der von [11] publizierte Datensatz experimenteller ellipsometrischer Messungen an Dünnschichtproben für 9 verschiedene Werte von x einschließlich $x = 0$, d. h. Ge, und $x = 1$, d. h. Si.

Alle numerischen Rechnungen wurden in der Programmiersprache FORTH formuliert und auf dem eigenen Elektronenrechner durchgeführt.

Die Übereinstimmung zwischen der Modelldarstellung und dem experimentellen Befund ist eindrucksvoll gut. Das gilt sowohl für die Spektralverläufe von Imaginärteil als auch von Realteil. Die in den dargestellten Spektren verbliebenen und dabei im wesentlichen statistisch streuenden Abweichungen liegen innerhalb der erwarteten Fehlergrenzen.

Die gefundenen Individualparameter für die Ge-Si-Mischkristallreihe werden mitgeteilt, so daß auch von anderer Seite die Modelldarstellung der Optischen Funktion im Bereich der Interbandanregung für diese Substanzklasse nachvollzogen werden kann. Dies mag als Hilfe dienen, eigene Messungen zu analysieren oder die optische Wirkung eines Mischkristalls dieser Art bei gegebener Schichtdicke unter Vorgabe des Zusammensetzungsparameters vorauszuberechnen.

Die neuartige Form der Modellierung der Optischen Funktion im Bereich der Interbandanregung der Halbleiter kann grundsätzlich auf andere Materialien übertragen werden und dort entsprechende Dienste leisten, sei es zur numerischen Analyse, sei es als methodischer Ansatz für eine Interpretation experimenteller Daten.

Danksagung

Herrn Dr. Michael Vergöhl, z. Zt. Fraunhofer Institut für Schicht- und Oberflächen-technik, Braunschweig, danke ich für hilfreiche Hinweise und Unterstützung bei der Literaturbeschaffung.

Literatur

- [1] F. R. Keßler, Bemerkungen zum inversen Problem der optischen Spektroskopie inhomogener Materie, Abh. Braunschweigischen Wiss. Ges., ISBN 3-88452-228-X vol. 46 (1995), p. 29–63
- [2] J. C. Maxwell Garnett, Colours in Metal Glasses, in Metallic Films, and in Metallic Solutions – II, Philos. Trans. R. Soc. London, vol. 205 (1905), p. 237–244
- [3] a) D. A. G. Bruggeman, Ann. Phys. (Leipzig), vol. 24 (1935), p. 636
b) B. Ubbo Felderhof, Dielectric Properties of Suspensions, Festkörperprobleme XXV (1985), F. Sauter (Herausgeber), Vieweg-Verlag, Braunschweig
- [4] vergl. z. B.
a) Max Born, Optik, 2. Auflage, Springer-Verlag, Berlin, 1965
b) Charles Kittel, Einführung in die Festkörperphysik, 5. Auflage, R. Oldenbourg Verlag, München, 1980
c) K.-H. Hellwege, Einführung in die Festkörperphysik, 2. Auflage, Springer-Verlag, Berlin, 1981
- [5] Die folgenden Buchpublikationen behandeln z. B. die Thematik der optischen Interbandanregung der Halbleiter in adäquater Weise:
a) David L. Greenaway and Gunther Harbeke, Optical Properties and Band Structure of Semiconductors, Pergamon Press, Oxford, 1968
b) J. N. Hodgson, Optical Absorption and Dispersion in Solids, Chapman and Hall Ltd., London, 1970
c) Frederick Wooten, Optical Properties of Solids, Academic Press, New York, 1972
d) M. L. Cohen and J. R. Chelikowsky, Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors, Springer-Verlag, Berlin, 1990
- [6] J. J. Hopfield, Absorption Edges in Insulating Crystals, Comments on Solid State Physics, vol. 1 (1968, No. 1, April–May), p. 16–18
- [7] J. S. Kline, F. H. Pollak, and M. Cardona, Electoreflectance of Ge-Si Alloys, Helv. Phys. Acta, vol. 41 (1968), p. 968
- [8] a) Michael Vergöhl, Magnetooptisches Dispersionsverhalten von Silizium-Germanium Mischkristallen, Dissertation, Techn. Universität Carolo Wilhelmina zu Braunschweig, Naturwiss. Fakultät, 1995; ISBN 3-89588-387-5
b) Michael Vergöhl, Klaus Dettmer, and Franz Rudolf Keßler, Magneto-optical dispersion of $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ epitaxial layers and Si/Ge superlattices, J. Appl. Phys., ISSN 0021-8979, vol. 81 (1997, 3, Febr.), p. 1434–1441
- [9] D. E. Aspnes and A. A. Studna, Dielectric Functions and Optical Parameters of Si, Ge, GaP, GaSb, InP, InAs, and InSb from 1.5 to 6.0 eV, Phys. rev. B, vol. 27 (1983), p. 985–1009
- [10] H. R. Philipp and H. Ehrenreich, Optical Properties of Semiconductors, Phys. Rev., vol. 129 (1963), p. 1550–1560
- [11] J. Humlíček, M. Carriga, M. I. Alonso, and M. Cardona, Optical Spectra of $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ Alloys, J. Appl. Physics, vol. 65 (1989, 7), p. 2827
- [12] Proc. Second Int. Conf. on Spectroscopic Ellipsometry (ICSE-II), 12–15 Mai 1997, Charleston/South Carolina, USA; in press
- [13] Günther Harbeke, Neue Ergebnisse zur Bandstruktur von Halbleitern aus optischen Messungen, Festkörperprobleme, Band 3 (1964), F. Sauter (Herausgeber), Verlag Friedrich Vieweg &

- Sohn, Braunschweig, p. 13–54 darin zitiert: Energiezustände der Diamanttyp- und Zinkblende-Halbleiter bei Raumtemperatur nach [14])
- [14] J. C. Phillips, Phys. Rev., vol. 133 (1964) A 452 zitiert in [13])
 - [15] E. Palik (Editor), Handbook of Optical Constants of Solids, vol. I (1985) and vol. II (1991), Academic Press, New York
 - [16] G. E. Jellison, Jr. and F. A. Modine, Parameterization of the optical functions of amorphous materials in the interband region, App. Phys. Lett., vol. 69 (1996, 15 July), p. 371–373; Erratum dazu: Appl. Phys. Lett., vol. 69 (14), 1996, p. 2137
 - [17] A. R. Forouhi and I. Bloomer,
 - a) Phys. Rev. B, vol. 34 (1986), p. 7018
 - b) Phys. Rev. B, vol. 38 (1988), p. 1865
 - [18] William H. Press, Aul A. Teukolsky, William T. Vetterling, and Brian P. Flannery, Numerical Recipes in FORTRAN, Second Edition, Cambridge University Press, Cambridge, 1992, ISBN 0 521 43064
 - [19] Amal K. Ghosh, Electreflectance Spectra and Band Structure of Germanium, Physikal Review, vol. 165 (3), (1968), p. 888–897
 - [20] C. D. Salzberg and John J. Villa,
 - a) J. Opt. Soc. Am., vol. 47 (1957), p. 244
 - b) J. Opt. Soc. Am., vol. 48 (1958), p. 579